

**STN INTERNATIONAL**

リフレッシュセミナー

# 合成文献検索

---

# 目次

## A 生成物を指定した検索

概要 .....	1
Q&A .....	2
CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイル .....	4
CAplus/CA ファイルの使い方 .....	9
CASREACT ファイルの使い方 .....	10
CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイルの併用 .....	12
検索例 1 .....	14
検索例 2 .....	24
ReaxysFile ファイル .....	24
検索例 3 .....	28

## B 反応検索

CASREACT, CAplus/CA, ReaxysFile ファイルの比較 .....	33
CASREACT ファイルの検索 .....	38
CAplus/CA ファイルの検索 .....	43
ReaxysFile ファイルの検索 .....	48
検索例 .....	54
まとめ .....	59

## C その他の反応情報収録ファイル

ChemInformRX ファイルと DJSMONLINE/DJSMDS ファイル .....	61
検索例 1 .....	63
参考: 化学反応 (REACTION) クラスターの利用 .....	68
医薬品合成データベース (PS ファイル) .....	73
検索例 2 .....	74

## A 生成物を指定した検索

STN には、合成文献情報を収録しているデータベースが多くあります。その中でよく使われている CA/CAplus, CASREACT, ReaxysFile ファイルの収録の違いや、使い方のコツについて、ご紹介します。



## A 生成物を指定した検索

### 概要

#### ■ STN には、合成反応を収録するさまざまなデータベースがある

- CA/CAplus      - CASREACT      - ReaxysFile      - PS      - ChemInformRX
- DJSMONLINE/DJSMDS      - WPINDEX/WPIDS/WPIX      - GMELIN97

#### ■ 代表的なデータベースの使い分け

- ・ 古い合成文献の調査

CAplus/CA	◎	CASREACT	○	ReaxysFile	◎	PS	×
ChemInformRX	×	DJSM	×	WPI	×	GMELIN97	◎

- ・ 医薬品の合成文献調査

CAplus/CA	◎	CASREACT	○	ReaxysFile	○	PS	◎
ChemInformRX	○	DJSM	○	WPI	○	GMELIN97	×

- ・ 無機物質の合成文献調査

CAplus/CA	◎	CASREACT	×	ReaxysFile	×	PS	×
ChemInformRX	×	DJSM	×	WPI	○	GMELIN97	◎

- ・ 化学反応式を使った反応検索

CAplus/CA	×	CASREACT	◎	ReaxysFile	×	PS	○
ChemInformRX	◎	DJSM	◎	WPI	×	GMELIN97	×

- ・ 官能基検索

CAplus/CA	×	CASREACT	◎	ReaxysFile	×	PS	×
ChemInformRX	×	DJSM	○	WPI	×	GMELIN97	×

- ・ 反応スキームの表示

CAplus/CA	×	CASREACT	◎	ReaxysFile	×	PS	◎
ChemInformRX	◎	DJSM	◎	WPI	×	GMELIN97	×

◎ 向いている, ○ 併用するとよい, × 向いていない

A 生成物を指定した検索

Q&A



CAplus ファイルで 合成文献を検索すれば、CASREACT ファイルでヒットする回答はすべて含まれますか？

いいえ、すべて含まれるとは限りません。CASREACT ファイルは、CAplus ファイルに比べて収録されているレコード数は少ないですが、CASREACT ファイルを使うと CAplus ファイルの検索では得られなかった合成文献が得られる場合があります。



■ 検索例：TAXOL に関する合成文献を網羅的に調査する

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> E TAXOL/CN 5 ← 化学物質名称を EXPAND する

E1 1 TAXOID OXYGENASE (TAXUS CUSPIDATA CLONE F9)/CN  
 E2 1 TAXOID-14-BETA-HYDROXYLASE (TAXUS CUSPIDATA)/CN  
 E3 1 --> TAXOL/CN  
 E4 1 TAXOL 2'-(2-HYDROXYETHYL SUCCINATE)/CN  
 E5 1 TAXOL 2'-CARBAMATE/CN

=> S E3 ← E 番号で検索する (670 円)

L1 1 TAXOL/CN

=> D ← IDE 表示形式で確認する (260 円)

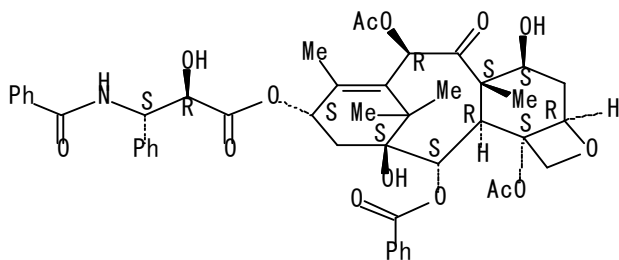
L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT © 1984  
 RN 33069-62-4 REGISTRY  
 ED Entered STN: 16 Nov 1984  
 CN Benzenepropanoic acid, β-(benzo-  
 (2aR, 4S, 4aS, 6R, 9S, 11S, 12S, 12aR, 1



タキソールの合成文献を網羅的に検索する場合は、塩や水和物等も含めて検索する。

↓  
 これを一成分とする多成分物質の検索を行いそれらの合成法も一緒に検索するとよい

Absolute stereochemistry. Rotation (-).



\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

=> S 33069-62-4/CRN ← 成分 CAS 登録番号検索を行う (無料)

L2 140 33069-62-4/CRN

=> S L1 OR L2 ← タキソールと多成分物質の回答をまとめる

L3 141 L1 OR L2

A 生成物を指定した検索

Q&A

=> FILE CAPLUS ← *CAPLUS* ファイルに入る

=> S L3/P ← /P で合成文献を検索する (無料)  
L4 1542 L3/P

=> FILE CASREACT ← *CASREACT* ファイルへ入る

=> S L3/PRO ← /PRO で合成文献を検索する (3,860 円)  
L5 84 L3/PRO



*CAPLUS* ファイルの回答と、*CASREACT* ファイルの回答をまとめる

=> FILE CAPLUS ← *CAPLUS* ファイルに入る

=> S L4 OR L5 ← *CAPLUS* ファイルと *CASREACT* ファイルの回答をまとめる (無料)  
L6 1547 L4 OR L5

=> S L5 NOT L4 ← *CASREACT* ファイルでのみヒットした回答  
L7 5 L5 NOT L4

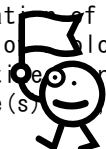
=> D SCAN TI CC ← 標題とセクションを確認する (無料)

L12 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
TI Synthesis of congeners and prodrugs. 3. Water-soluble prodrugs of taxol  
with potent antitumor activity  
CC 30-20 (Terpenes and Terpenoids)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):4

L12 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
TI Novel chemistry of taxol. Retrosynthetic and synthetic studies  
CC 30-20 (Terpenes and Terpenoids)

L12 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
TI Process for the preparation of beta-phenylisoserine derivatives and their  
use in the preparation of biologically active taxane derivatives  
CC 34-2 (Amino Acids, Peptides, and Nucleosides)  
Section cross-reference(s)



*CASREACT* ファイルのほうが、ヒット件数が少なくても  
*CASREACT* ファイルのみでヒットする回答もある

L12 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
TI Method for synthesis of Paclitaxel and Docetaxel  
TIJP パクリタキセルとドセタキセルの合成のための方法 [機械翻訳]  
CC 30-20 (Terpenes and Terpenoids)

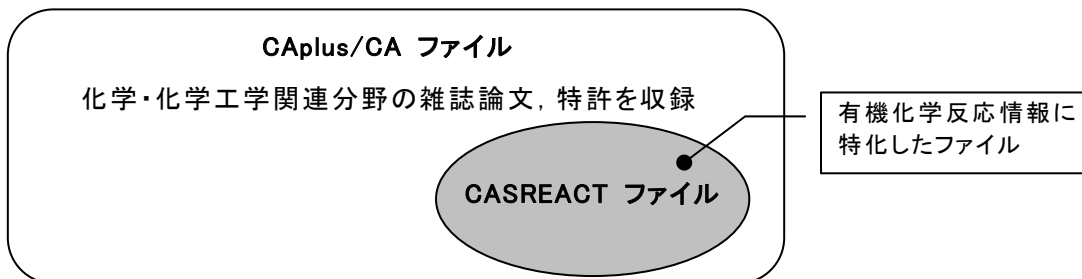
L12 5 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
TI Total synthesis of taxol  
CC 30-20 (Terpenes and Terpenoids)

ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

## A 生成物を指定した検索

### CPlus/CA ファイルと CASREACT ファイル

#### ■ CPlus/CA ファイルと CASREACT ファイルの関係（文献情報の比較）



#### ■ CPlus/CA ファイルと CASREACT ファイルの収録内容の比較（2008 年 8 月現在）

項目	CASREACT	CPlus/CA
収録年	1840 年以降	1808 年以降 (/P が付与されているのは 1907 年以降)
収録数	67 万件（レコード数） 1,500 万件（単段階・多段階反応数）	460 万件（/P が付与されているレコード数） —
対象となる文献・特許	狭い (CA に収録されている一部のレコード *1)	CA 収録対象の化学・化学関連分野
索引方針	新規性・進歩性のある「反応」 一部の文献はすべての反応 ・ 1985 ~ 1990 年までの反応情報 ・ 他データベース由来の情報（30%）  単に新規物質の合成法のみを収録するわけではない。	主題に関連した，重要あるいは新規性/進歩性のある物質 (生成物については，基本的に物性データが必要)
特徴	ポリマーの重合反応，工業的合成法はあまり収録されていない  基本的な合成法は，最近では収録対象外。 (1991 年以降，CAS は，何らかの新規性のある反応のみ選択して収録している)  反応に関与するすべての物質情報（反応物，生成物，試薬，溶媒，触媒）を収録 収率も原文に記載があれば収録 - 上記の情報を利用した，精密な反応検索が可能	幅広く合成文献を検索できる。*2  昔からよく利用されている基本的な合成法も調べることができる。  著者が強調していない限り，試薬，溶媒，触媒は索引されない  収率情報は入っていない - CAS ロールを用いれば，ある程度検索が可能



CASREACT ファイルは，CPlus/CA ファイルに比べて対象となる文献，特許は少ないが，CPlus ファイルとは索引方針が異なるので，CASREACT ファイルでのみ収録されている反応情報がある



## A 生成物を指定した検索

### CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイル

#### \*1 CASREACT ファイルの収録年代による変遷

年代	対象文献	収録する反応
1985-1990 年	主要雑誌約 100 誌 (主に有機化学セクション)	文献中のすべての反応
1991 年以降	すべての雑誌論文 (主に有機化学セクション)	合成的に意味のある反応
	1991 年 1 月 1 日以降発行の特許 (主に有機化学セクション)	
遡及収録 (1840-2000 年)	InfoChem/INPI 由来の情報 (約 30%) Biotransformations database の酵素反応 (CA に収録されている雑誌/特許のみ対象)	

\* セクションとは、雑誌論文や特許を主題ごとに分けた分野 (セクション) を指す。生化学、有機化学、高分子化学、応用科学・化学工学、物理・無機・分析化学の 5 つのセクションがある。



CASREACT ファイルは、一部の年代や遡及収録においては、新規性/進歩性の有無にかかわらず、反応情報を収録している

#### \*2 CAplus/CA ファイルでの合成文献

- CAplus/CA ファイルでは、合成文献は REGISTRY ファイルの L 番号/P で検索できる。
  - /P と、/PREP (CAS ロール) は同じ検索になる。  
ただし、/P は無料だが、/PREP は検索語料が 1 語分課金されるので注意
  - 製造に関する CAS ロール

	英語名	定義	期間
PREP	Preparation	製造	1907-
BMF	Bioindustrial Manufacture	生化学的工業生産	1967-
BPN	Biosynthetic Preparation	生化学的合成	1967-
BYP	Byproduct	副生成物	1967-
CPN	Combinatorial Preparation	コンビナトリアルケミストリーによる合成	2002-
IMF	Industrial Manufacture	化学的工業生産	1967-
PUR	Purification or Recovery	精製	1967-
SPN	Synthetic Preparation	化学合成	1967-
PNU	Preparation, Unclassified	上記以外の製造	1967-2006



/P を用いると、化学合成以外の合成法や、CASREACT ファイルで入手しにくい工業的生産などの文献もあわせて入手できる。

A 生成物を指定した検索

CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイル

■ CAplus/CA ファイルに反応情報が収録されていないレコード例

・ 単離・同定されていない反応中間体

実施例 N-エチル-N-(2-メチルフェニル)-2-ブテナミド  
 4つフラスコにトルエン12gとクロトン酸12.0g(0.139モル)を加え、-5℃~10℃に冷却した。攪拌下、-5~15℃で塩化チオニル17.17g(0.144モル)を滴下した。-5~15℃で4時間攪拌し、1.8~4.6ml/minの速度で窒素ガスを5時間通気した。  
 トルエン22.34gにN-エチル-ο-トルイジン17.91g(0.132モル)と、26%水酸化ナトリウム水溶液75.3gを加えた溶液に、5~20℃で、先に調整したクロトンクロリドの反応溶液を滴下した。トルエン1.8mlで酸クロリドを調整した容器を洗浄し、反応溶液に流入し、5~20℃で、30分間攪拌した。  
 反応マスのGC分析値はN-エチル-N-(2-メチルフェニル)-2-ブテナミド 96.7%(GC修正面積百分率)、塩化水素付加体 2.1%、水付加体0.01%であった。この反応マス(マスは、N-エチル-N-(2-メチルフェニル)-2-ブテナミド量 18.7wt%、トルエン 24.9wt%、NaOH 9.0wt%、水 38.6wt%、NaCl 6.0wt% など含む) 144gをフラスコに仕込み、窒素雰囲気下とした。反応マスに塩化ベンジルトリエチルアンモニウムを 2.5g 添加して、55℃まで昇温し、50~60℃でアルカリ処理操作を6~9時間行った。  
 反応マスはN-エチル-N-(2-メチルフェニル)-2-ブテナミド 98.6%(GC修正面積百分率)、塩化水素付加体は検出されず、水付加体は0.02%であった。

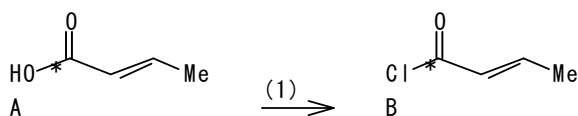
AN 145:356517 CASREACT [Full-text](#)  
 TI Preparation of high-purity N-ethyl-N-(2-methylphenyl)-2-butenamide

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
JP 2006249039	A	20060921	JP 2005-70976	20050314

IT Alkali metal hydroxides  
 RL: RGT (Reagent); RACT (Reactant or reagent)  
 (preparation of HCl salt-free ethyl(methylphenyl)butenamide)  
 IT 56-37-1, Benzyltriethylammonium chloride  
 RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)  
 (preparation of HCl salt-free ethyl(methylphenyl)butenamide)  
 IT 483-63-6P  
 RL: IMF (Industrial manufacture); PUR (Purification or recovery); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (preparation of HCl salt-free ethyl(methylphenyl)butenamide)  
 IT 94-68-8, N-Ethyl-o-toluidine 3724-65-0, Crotonic acid **10487-71-5**, 2-Butenoyl chloride  
 RL: **RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)**  
 (preparation of HCl salt-free ethyl(methylphenyl)butenamide)  
 IT 1310-73-2, Sodium hydroxide, reactions  
 RL: RGT (Reagent); RACT (Reactant or reagent)  
 (preparation of HCl salt-free ethyl(methylphenyl)butenamide)

中間体だが、単離・同定されていないため、製造 (PREP) としては索引されていない

RX(1) OF 3 A ==> B...

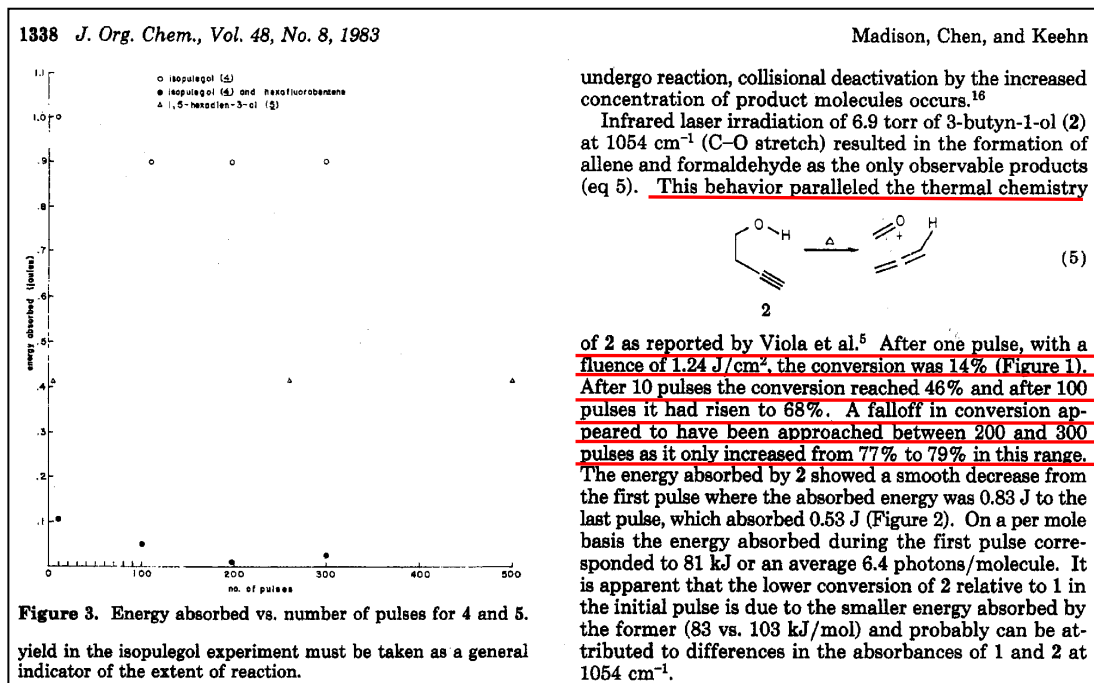


RX(1) RCT A 3724-65-0  
 RGT C 7719-09-7 SOCl2  
 PRO B 10487-71-5

A 生成物を指定した検索

CAplus/CA ファイルと CASREACT ファイル

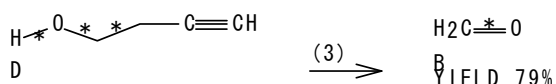
索引の観点



AN 98:159920 CASREACT Full-text  
 TI Organic chemistry by infrared lasers. 4. Laser-induced reactions by β-unsaturated alcohols  
 AU Madison, Stephen A.; Chen, Ruth; Keehn, Philip M.  
 CS Dep. Chemical, Brandeis University, Waltham, MA, 02254, USA  
 SO Journal of Organic Chemistry (1983), 48(8), 1336-40  
 CODEN: JOCEAH; ISSN: 0022-3263  
 DT Journal  
 LA English  
 CC 22-4 (Physical Organic Chemistry)  
 ST laser photolysis unsatd alc  
 IT Addition reaction  
 (ene, retro, laser-induced, of unsatd. alcs.)  
 IT Cope rearrangement  
 (oxy-, laser-induced, of unsatd. alcs.)  
 IT Alcohols, reactions  
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
 (unsatd., laser-induced reactions of)  
 IT 89-79-2 627-27-0 924-41-4 **927-74-2** 5557-87-9  
 RL: **PRP (Properties)**  
 (laser-induced reaction of)

レーザーで分解するという「性質」として索引

RX(3) OF 11 D ==> B

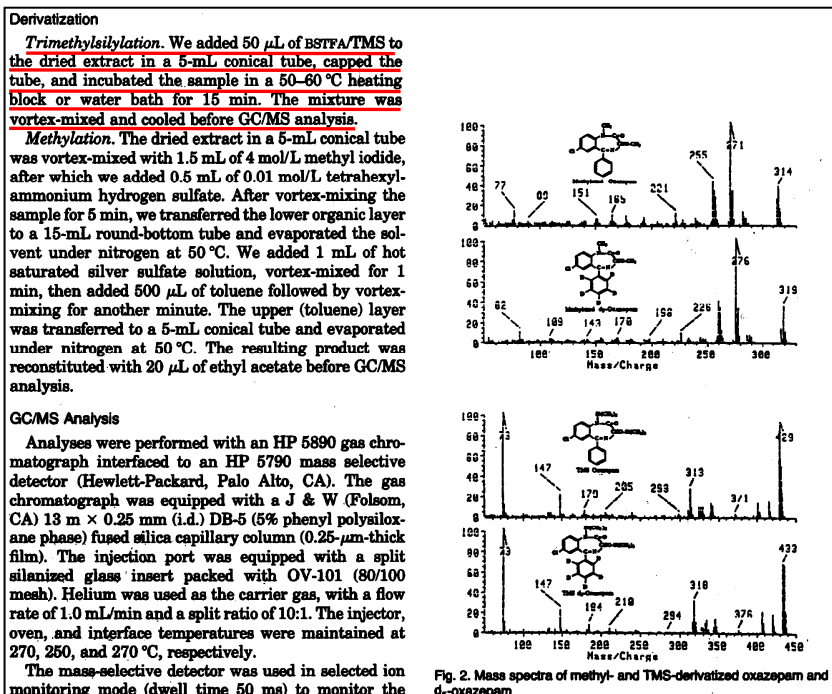


RX(3) RCT D 927-74-2  
 PRO B 50-00-0

A 生成物を指定した検索

CAlplus/CA ファイルと CASREACT ファイル

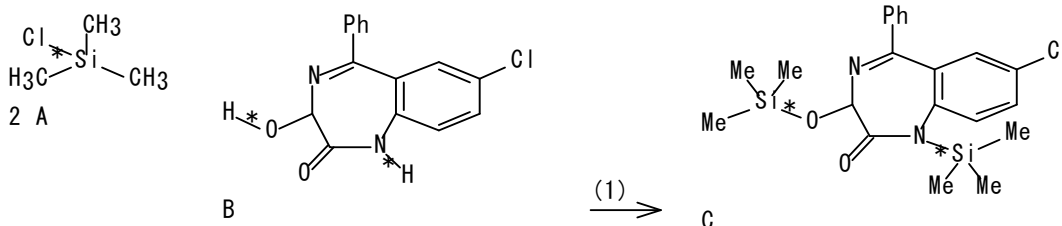
・ 同定のための合成反応



AN 115:173992 CASREACT Full-text  
 TI Enzymic digestion, solid-phase extraction, and gas chromatography/mass spectrometry of derivatized intact oxazepam in urine  
 SO Clinical Chemistry (Washington, DC, United States) (1991), 37(9), 1595–601  
 ST oxazepam urine benzodiazepine metabolite mass spectroscopy; gas chromatog  
 oxazepam urine benzodiazepine metabolite  
 IT Urine analysis  
 (oxazepam determination in human, by gas chromatog.-mass spectroscopy)  
 IT 604-75-1, Oxazepam  
 RL: ANT (Analyte); ANST (Analytical study)  
 (determination of, in human urine, by gas chromatog.-mass spectroscopy)  
 IT 12794-10-4D, Benzodiazepine, derivs.  
 RL: ANT (Analyte); ANST (Analytical study)  
 (determination of, in human urine, by gas chromatog.  
 oxazepam formation in relation to)

同定のための反応なので、「分析」として索引。反応情報としては、索引されていない

RX(1) OF 5 2 A + B ==> C



RX(1) RCT A 75-77-4, B 604-75-1  
 PRO C 55319-93-2  
 CAT 25561-30-2 Me3SiN:C(CF3)OSiMe3

A 生成物を指定した検索

CAplus/CA ファイルの使い方

■ CAplus ファイルでの合成文献の検索

- => FILE CAPLUS
- => S REGISTRY ファイルの L 番号/P (無料)
- => D BIB HITSTR (488 円)

- ・ /P をつけると、無料で 1907 年以降の合成文献に絞り込むことができる。
- ・ オススメの表示形式 HITSTR, FHITSTR (331 円/件)
  - 構造検索など、多くの物質をクロスオーバー検索したときなどに特に有効

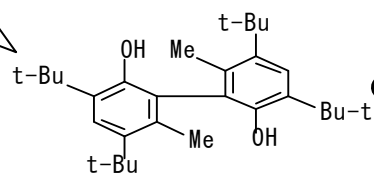
```

AN 2002:169562  CAPLUS  Full-text
DN 136:216527
ED Entered STN: 08 Mar 2002
TI Preparation of 2,2'-dihydroxybiphenyls from phenols
IN Takuma, Yuki; Tanaka, Yoshiyuki; Nakashima, Iwao; Kasuga, Yuzo
PA Mitsubishi Chemical Corp., Japan
:
CC 25-10 (Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds)
FAN.CNT 1
PATENT NO.      KIND  DATE      APPLICATION NO.  DATE
-----
PI JP 2002069022  A      20020308  JP 2000-260602  20000830
PRAI JP 2000-260602      20000830
:
OS CASREACT 136:216527; MARPAT 136:216527
AB Oxidative coupling reaction of phenols is carried out in a batch or a continuous flow process in the presence
of catalysts using O as an oxidizing agent, wherein O concentration in the reaction solution is adjusted
to ≤33 mg/L until phenol conversion reaches to 70% (in the batch
:
ST biphenyl dihydroxy prepn phenol oxidative coupling; phenol oxidative coupling oxygen concn
IT Coupling reaction
Coupling reaction catalysts
(oxidative; preparation of dihydroxybiphenyls from phenols)
IT Amines, uses
Transition metal compounds
RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
(preparation of d
IT Phenols, reactions
RL: RCT (Reactant);
(preparation of d
IT 110-18-9  7440-50-8
RL: CAT (Catalyst use)
(preparation of d
IT 6390-68-7P, 3, 3', 5, 5'
RL: IMF (Industrial
(pr
ation of d
IT 497-39-1  2, 4-Di-t
RL: RCT (Reacta
(preparation of d
    
```

ヒットした CAS 登録番号がハイライトされても、どんな物質なのかがわかりにくい...

```

IT 6390-68-7P, 3, 3', 5, 5'-Tetra-tert-butyl-6, 6'-dimethyl-2, 2'-
dihydroxybiphenyl
RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation);
PREP (Preparation)
(preparation of dihydroxybiphenyls from phenols)
RN 6390-68-7  CAPLUS
CN [1, 1'-Biphenyl]-2, 2'-diol, 3, 3', 5, 5'-tetrakis
(1, 1-dimethylethyl)-6, 6'- dimethyl- (CA INDEX NAME)
    
```



ヒットした CAS 登録番号と、名称 (CA 索引名), 構造が一緒に表示できて便利

HITSTR  
表示形式

## A 生成物を指定した検索

### CASREACT ファイルの使い方

#### ■ CASREACT ファイルでの合成文献の検索

=> FILE CASREACT

=> S CAS 登録番号/PRO (930 円/CAS 登録番号)

または

=> S REGISTRY ファイルの L 番号/PRO (3,860 円/L 番号)

=> D BIB FHIT (450 円/件)

#### ■ ポイント

- ・ CAS 登録番号 (あるいは, REGISTRY ファイルの L 番号) に /PRO をつけて検索する
  - 化学物質名称からは検索できない.
- ・ CAS 登録番号検索と, REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索では, 課金が異なる.



- ・ 5 物質以上の場合 → REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号
- ・ 4 物質以下の場合 → CASREACT ファイルで CAS 登録番号を入力

- CAS 登録番号に, 直接ロールを指定する方法 (930 円 / 1 CAS 登録番号)

=> S 50-00-0/PRO ← ホルムアルデヒドを生成物とする反応 (930 円)  
L1 462 50-00-0/PRO \* DR (削除された CAS 登録番号での検索はできない)

- REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号にロールを指定する方法 (3,860 円/L 番号)  
(回答セットは, 構造検索の結果でも, 辞書検索の結果でもよい)

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S FORMALDEHYDE/CN  
L1 1 FORMALDEHYDE/CN

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

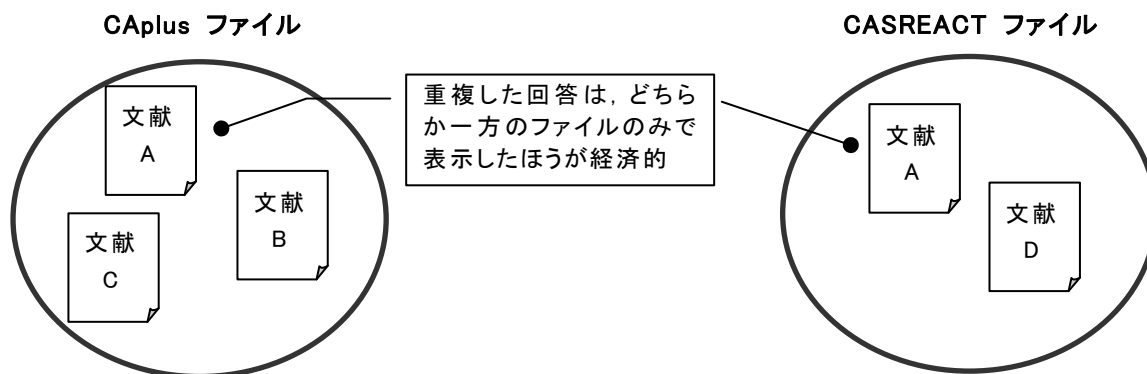
=> S L1/PRO ← ホルムアルデヒドを生成物とする反応 (3,860 円)  
L2 462 L1/PRO



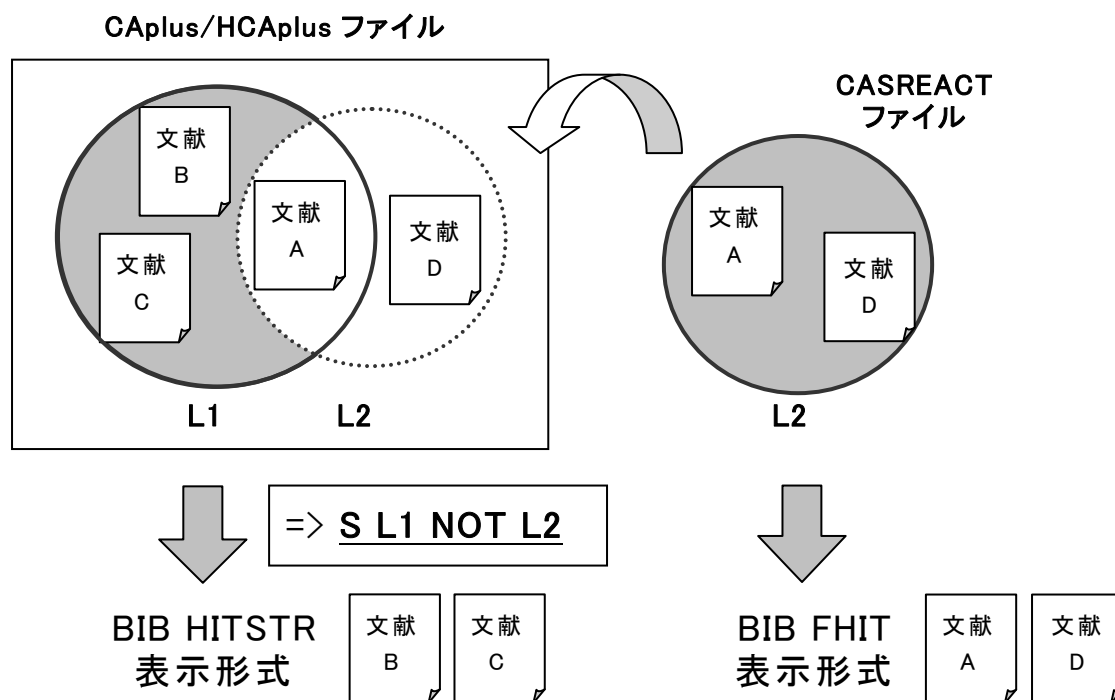
## A 生成物を指定した検索

### CPlus ファイルと CASREACT ファイルの併用

- 通常, CPlus/CA ファイルでヒットした回答と, CASREACT ファイルでヒットした回答は, 重複が存在する.



- 重複除去 1: できるだけ反応情報として表示したい場合.



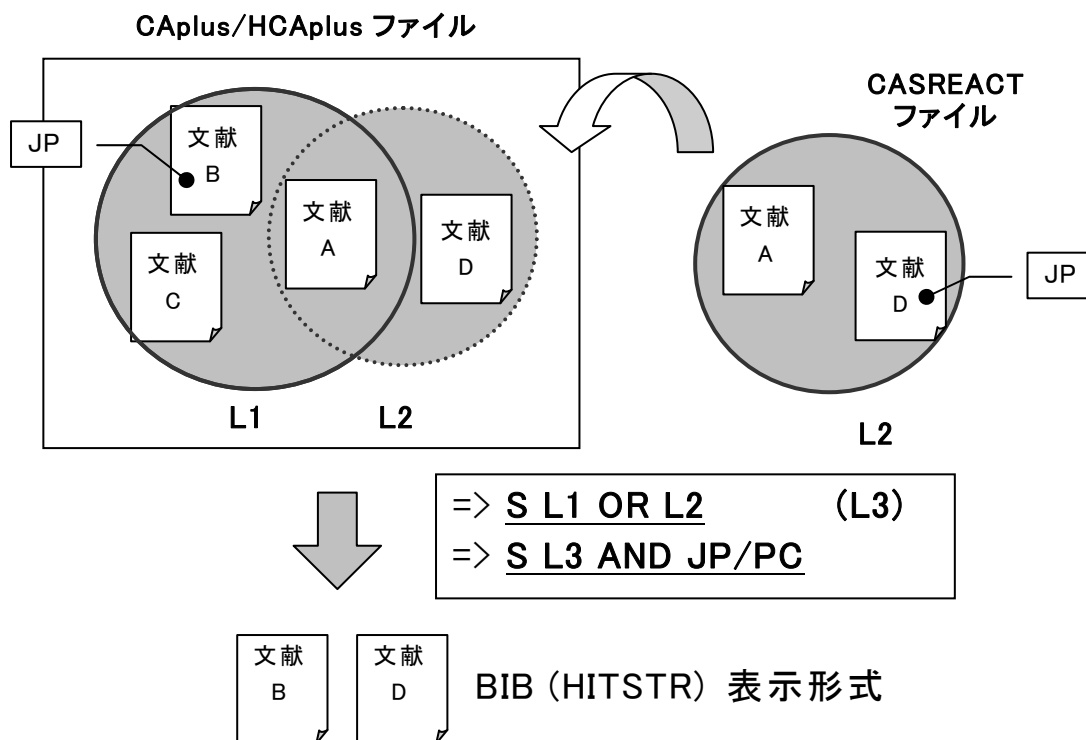
- ・ CPlus/CA ファイルで合成文献を検索した後, CASREACT ファイルでも検索する
- ・ CASREACT で反応情報を表示した後, (H) CPlus ファイルへ, CASREACT ファイルの L 番号をクロスオーバーし, (H) CPlus ファイルの回答から除く. (ZCPlus ファイルは不可)
- ・ CASREACT ファイルは, CPlus/CA ファイルより検索可能なフィールドが少ないので, 絞込みを行いたいときには, その 2 の方法を利用したほうがよい.
- ・ CPlus/HCAplus/ZCPlus ファイルの回答を CASREACT ファイルにクロスオーバーすることはできない. (CA/HCA/ZCA は可能)



## A 生成物を指定した検索

### CAplus ファイルと CASREACT ファイルの併用

- 重複除去 2: 合成文献を検索した後、さらに絞り込みたい場合.



- ・ CASREACT ファイルでは、下記の検索はできない
  - 対応特許の検索 (/PY, /PC, /PK を用いると自動的にベーシック特許限定になる)
  - IPC の検索
  - 統制語 (/CT), 会社名 (/CO) のシソーラスを使った検索
  - IT フィールド中の CAS 登録番号, CAS ロールの検索



絞り込みたいときには、(H) CAplus ファイルで絞り込みを行う

- ・ CASREACT で得られた回答を表示せずに、そのまま (H) CAplus ファイルへクロスオーバーし (H) CAplus ファイルの回答とあわせる。(ZCAplus ファイルは不可)
- ・ CAplus ファイルでは、書誌情報を見ることはできるが、CASREACT ファイルの反応情報を見ることはできない。
  - (H) CAplus/(H) CA ファイルでは、反応情報が収録されていないため、表示できない。
  - 反応情報を表示させたい場合には、HCAplus ファイルの DN を HCA ファイルに /AN で TRANSFER する。(あるいは、SELECT コマンドを用いる。)そして、その結果の L 番号を CASREACT ファイルにクロスオーバーし、CASREACT ファイルでヒットした元の集合とかけ合わせれば、反応情報を表示できる。

## A 生成物を指定した検索

### 検索例 1

- 検索例 1: ある構造を有する化合物の合成文献を調べる. できる限り反応情報で表示したい



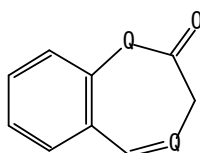
できる限り幅広く合成文献を検索するときは, CAplus ファイルと CASREACT ファイルを併用するとよい.  
反応情報として表示する場合は, CASREACT ファイルでまずは表示するとよい

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=>

Uploading C:\¥Documents and Settings¥My Documents¥STN Express 8.3¥Queries¥EXAMPLE1.str  
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> D QUE L1 ← 構造質問式を表示して確認する (無料)  
L1 STR



Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.

=> S L1 ← サンプル検索 (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*  
PROJECTED ITERATIONS: 101184 TO 109896  
PROJECTED ANSWERS: 15894 TO 19460

L2 50 SEA SSS SAM L1

=> S L1 FUL ← フルファイル検索 (23,200 円)  
L3 16696 SEA SSS FUL L1

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L3/P ← /P で合成文献に限定する (無料)

L4 1818 L3/P

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る

=> S L3/PRO ← /PRO で合成文献に限定する (3,860 円)

L5 364 L3/PRO

A 生成物を指定した検索

検索例 1

=> D 3 BIB FHIT

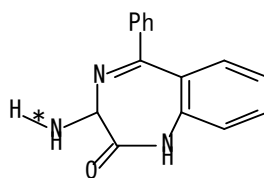
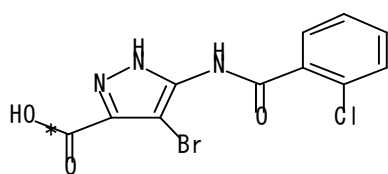
← 3 番目の回答を BIB FHIT 表示形式で表示する (151 + 299 = 455 円)

L5 ANSWER 3 OF 364 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 147:541777 CASREACT [Full-text](#)  
 TI Preparation and Optimization of a Series of 3-Carboxamido-5-phenacylamino-  
 pyrazole Bradykinin B1 Receptor Antagonists  
 AU Dressen, Darren; Garofalo, Albert W.; Hawkinson, Jon; Hom, Dennis;  
 Jagodzinski, Jacek; Marugg, Jennifer L.; Neitzel, Martin L.; Pleiss,  
 Michael A.; Szoke, Balazs; Tung, Jay S.; Wone, David W. G.; Wu, Jing;  
 Zhang, Heather  
 CS Elan Pharmaceuticals, Inc., South San Francisco, CA, 94080, USA  
 SO Journal of Medicinal Chemistry (2007), 50(12), 2007-2016

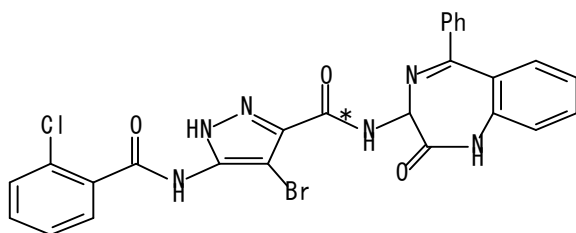


まず、CASREACT ファイルで表示する

RX(12) OF 132 ...B + AK ==> AL



(12) →



RX(12) RCT B 957134-37-1, AK 103343-47-1  
 RGT D 2592-95-2 1-Benzotriazolol, E 109-02-4 N-Methylmorpholine, F  
 25952-53-8 EDAP  
 PRO AL **796036-07-2**  
 SOL 68-12-2 DMF  
 CON 18 hours, room temperature  
 RE.CNT 16 THERE ARE 16 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

A 生成物を指定した検索

検索例 1

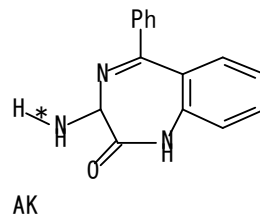
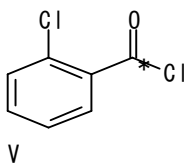
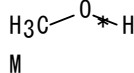
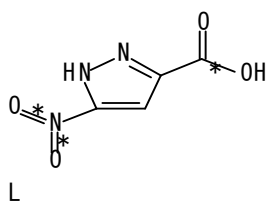
=> D 3 FPATH

← 3 番目の回答を FPATH 表示形式で表示する (449 円)

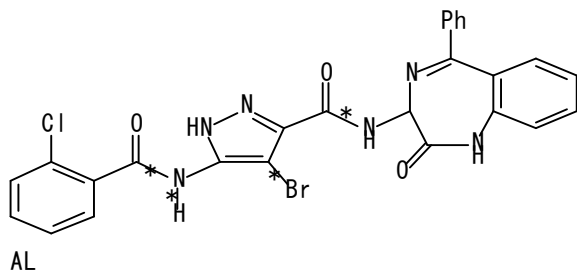
L5 ANSWER 3 OF 364 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN

RX(116) OF 132 COMPOSED OF RX(4), RX(5), RX(6), RX(7), RX(8), RX(12)

RX(116) L + M + V + AK ==> AL



6  
STEPS  
→



RX(4) RCT L 198348-89-9, M 67-56-1



/PRO で検索した結果に対し、FPATH 表示形式を使用すると CASREACT ファイルのレコード中、その物質が合成された最大の長さのルートが表示される。つまり、その物質が作られた文献中の出発原料がわかる。

STAGE(2)

RGT P 144-55-8 NaHCO3  
SOL 7732-18-5 Water, 141-78-6 AcOEt  
CON neutralized

PRO N 181585-93-3  
NTE Fisher esterification

RX(5) RCT N 181585-93-3  
RGT T 1333-74-0 H2  
PRO S 632365-54-9  
CAT 7440-05-3 Pd  
SOL 67-56-1 MeOH  
CON 2 hours, room temperature, 40 psi

RX(6) RCT S 632365-54-9

STAGE(1)

RGT X 110-86-1 Pyridine, Y 1122-58-3 4-DMAP  
SOL 109-99-9 THF, 75-09-2 CH2Cl2  
CON 10 minutes, cooled

:

A 生成物を指定した検索

検索例 1

=> D 167 190 218 BIB IND FHIT ← 167, 190, 218 番目の回答を BIB IND FHIT 表示形式で表示する  
(496 円/件 × 3 = 1,488 円)

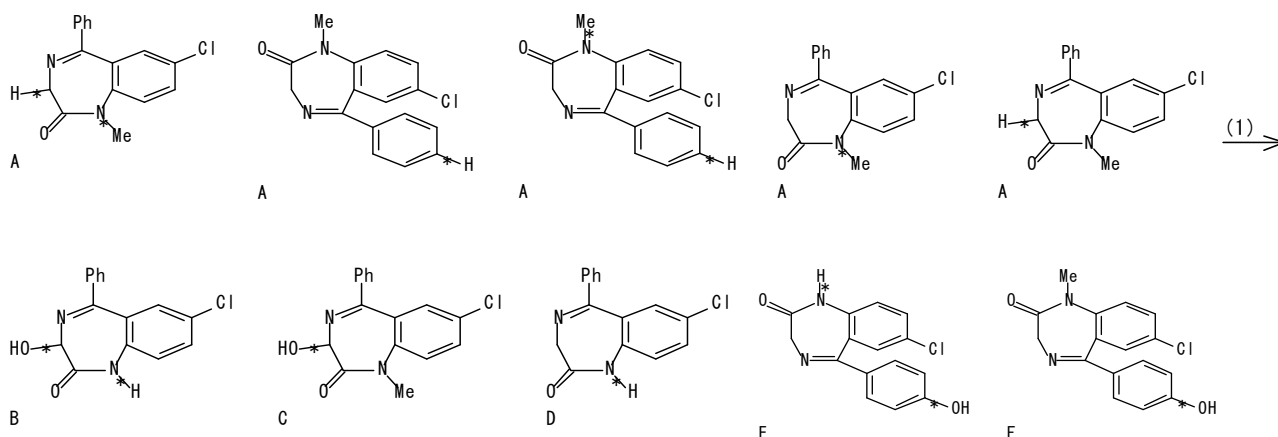
L5 ANSWER 167 OF 364 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
AN 120:49812 CASREACT [Full-text](#)  
TI Metabolism of xenobiotics by Beauveria bassiana  
AU Griffiths, D. A.; Brown, D. E.; Jezequel, S. G.  
CS Cranfield Biotechnol. Cent., Cranfield Inst. Technol.,  
Cranfield/Bedfordshire, MK43 0AL, UK  
SO Xenobiotica (1993), 23(10), 1085-100  
CODEN: XENOBH; ISSN: 0049-8254  
DT Journal  
LA English  
CC 10-2 (Microbial, Algal, and Fungal Biochemistry)

CASREACT ファイルでのみ  
ヒットした回答 ①

IT 9038-14-6, Monooxygenase  
RL: BIOL (Biological study)  
(cytochrome P 450-dependent, in Beauveria bassiana xenobiotic metabolism)  
IT **604-75-1**, Oxazepam **846-50-4**, Temazepam **1088-11-5** **17270-12-1**  
**17311-35-2**, 4'-Hydroxydiazepam  
RL: FORM (Formation, nonpreparative)  
(formation of, from diazepam by Beauveria bassiana)  
IT 3066-12-4  
RL: FORM (Formation, nonpreparative)  
(formation of, from testosterone by Beauveria bassiana)  
IT 24579-14-4, 4'-Hydroxywarfarin 119465-33-7 152129-34-5  
RL: FORM (Formation, nonpreparative)  
(formation of, from warfarin by Beauveria bassiana)  
IT 9035-51-2, Cytochrome P 450, biological studies  
RL: BIOL (Biological study)  
(monooxygenases containing, in Beauveria bassiana xenobiotic metabolism)

生成 (意図的合成ではない)  
\* 1994 年前半より前は、コンピュータ  
アルゴリズムによって付与

RX(1) OF 3 5 A ==> B + C + D + E + F



RX(1) RCT A 439-14-5  
PRO B **604-75-1**, C **846-50-4**, D **1088-11-5**  
, E **17270-12-1**, F **17311-35-2**  
CAT 9035-51-2 Cytochrome P 450  
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH  
CON 48 hours, 27 deg C, pH 7  
NTE regiosel



酵素を使った生物学的合成も  
収録している

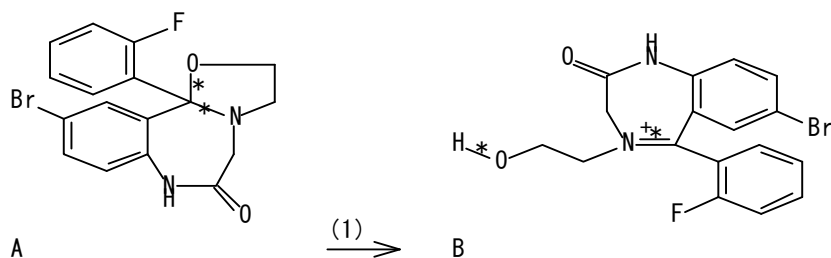
A 生成物を指定した検索

検索例 1

L5 ANSWER 190 OF 364 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 114:143377 CASREACT [Full-text](#)  
 TI Asymmetric transformation. IV. Formation of the optical  
 crystals of 1,4-benzodiazepinooxazoles  
 AU Okada, Yutaka; Takebayashi, Toyonori; Aoki, Seiichi; Sato, Sadao  
 CS Process Dev. Laboratory, Sankyo Co., Ltd., Tokyo, 140, Japan  
 SO Heterocycles (1990), 31(11), 1923-6  
 CODEN: HTCYAM; ISSN: 0385-5414  
 DT Journal  
 LA English  
 CC 28-21 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))  
 Section cross-reference(s): 22, 75  
 ST fluorobenzodiazepinooxazole conformation crystal mol structure; asym  
 transformation optically active benzodiazepinooxazole  
 IT Conformation and Conformers  
 Crystal structure  
 Kinetics of epimerization  
 Molecular structure  
 (of fluorobenzodiazepinooxazoles)  
 IT 88195-91-9 132818-26-9 132818-27-0  
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
 (conformation, crystal structure, and kinetics of epimerization of)  
 IT 24166-13-0P  
 RL: PRP (Properties); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (preparation and crystal structure of)  
 IT 24143-15-5P 24143-25-7P  
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT  
 (Reactant or reagent)  
 (preparation and epimerization of)

CASREACT ファイルでのみ  
ヒットした回答 ②

RX(1) OF 1 A ==> B



CAplus ファイルでは  
索引されていない

RX(1) RCT A 59128-97-1  
 PRO B **121179-88-2**  
 SOL 67-56-1 MeOH



1985 ~ 1990 年は, 主要雑誌 100 誌中,  
該当する文献のすべての反応を収録

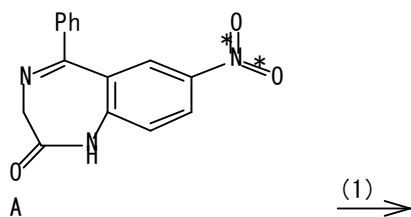
A 生成物を指定した検索

検索例 1

L5 ANSWER 218 OF 364 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 109:135068 CASREACT [Full-text](#)  
 TI Spectrophotometric determination of some pharmaceutically  
 compounds in their dosage forms  
 AU Hassan, S. M.; Belal, F.; Sharaf EL-Din, M.; Sultan, M.  
 CS Faculty Pharm., University Mansoura, Mansoura, Egypt  
 SO Analyst (Cambridge, United Kingdom) (1988), 113(7), 1087-9  
 CODEN: ANALAO; ISSN: 0003-2654  
 DT Journal  
 LA English  
 CC 64-3 (Pharmaceutical Analysis)  
 ST spectrophotometry nitro drug detn; oxamniquine detn spectrophotometry;  
 nitrazepam detn spectrophotometry; chloramphenicol detn spectrophotometry  
 IT Spectrochemical analysis  
 (for nitro drugs)  
 IT Pharmaceutical analysis  
 (nitro drugs determination in, spectrophotometric)  
 IT 56-75-7, Chloramphenicol **146-22-5**, Nitrazepam 21738-42-1, Oxamniquine  
 RL: ANT (Analyte); ANST (Analytical study)  
 (determination of, in pharmaceuticals by spectrophotometry)

CASREACT ファイルでのみ  
 ヒットした回答 ③

RX (1) OF 2 A ==> B



同定のための反応なので、分析  
 (ANST) のロールを索引

RX (1) RCT A 146-22-5  
 PRO B 4928-02-3



INFOCHEM 由来の反応

A 生成物を指定した検索

検索例 1

=> FILE CAPLUS

← CAplus ファイルに入る

=> S L4 NOT L5

← CAplus ファイルのみでヒットした回答に限定する (無料)

L6 1478 L4 NOT L5

=> D 1 7 242 1478 BIB HITSTR

← 1, 7, 242, 1478 番目の回答の書誌情報とヒットした構造を表示する (488 円 × 4 = 1,952 円)

L6 ANSWER 1 OF 1478 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN

AN 2008:675038 CAPLUS [Full-text](#)

DN 149:11872

TI Crosslinked polysaccharide derivatives as chromatographic carriers or other substrates

TIJP 架橋多糖類誘導体. クロマトグラフィー担体その使用 [機械翻訳]

IN Francotte, Eric; Zhang, Tong

PA Switz.

SO U.S. Pat. Appl. Publ., 24pp., Cont.-in-part of U.S. Ser. Number 983,392, abandoned.

CODEN: USXXCO

DT Patent

LA English

FAN. CNT 3

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 20080132695	A1	20080605	US 2008-31179	20080214
	WO 9704011	A1	19970206	WO 1996-EP3145	19960717
	W: AL, AU, BB, BG, BR, CA, CN, CU, CZ, EE, GE, HU, IL, IS, JP, KP, :				
	JP 2008081745	A	20080410	JP 2007-290774	20071108
PRAI	CH 1995-2160	A	19950721		
	CH 1996-1608	A	19960627		
	WO 1996-EP3145	W	19960717		
	US 1998-983392	B2	19980209		
	JP 1997-506291	A3	19960717		

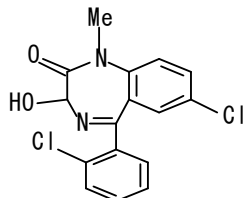
IT **848-75-9P**

RL: PUR (Purification or recovery); PREP (Preparation)

(separation; manufacture of crosslinked polysaccharide derivs. for coating chromatog. carriers useful for enantiomer separation or other substrate surfaces)

RN 848-75-9 CAPLUS

CN 2H-1,4-Benzodiazepin-2-one, 7-chloro-5-(2-chlorophenyl)-1,3-dihydro-3-hydroxy-1-methyl- (CA INDEX NAME)



残りを CAplus ファイルで表示する  
↓  
CAplus ファイルのみでヒットした回答

精製 (PUR) でのみ製造された物質は CASREACT ファイルに収録されていない

L6 ANSWER 7 OF 1478 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN

AN 2008:322118 CAPLUS [Full-text](#)

DN 148:338990

TI Novel soluble 1,4-benzodiazepine compounds and stable salts thereof for dosage forms

TIJP 投与形のためのそれらの新規な可溶性1,4-ベンゾジアゼピン化合物と安定した塩類 [機械翻訳]



A 生成物を指定した検索

検索例 1

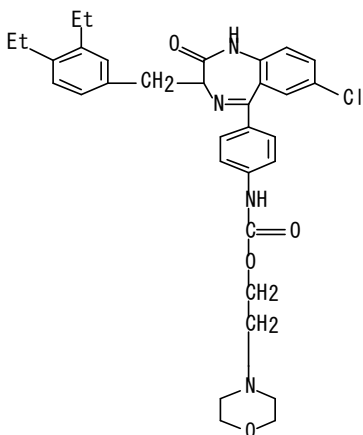
IN Durrani, Manzer; Geiss, William B.; Fairfax, David J.; Tymoshenko, Dmytro O.; Le, Van-Duc; Peterson, Lisa H.  
 PA The Regents of the University of Michigan, USA  
 SO U.S. Pat. Appl. Publ., 41pp.  
 CODEN: USXXCO  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 20080064686	A1	20080313	US 2007-796039	20070426

IT **1010421-83-6P 1010421-84-7P**  
 RL: SPN (Synthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL (Biological study);  
 PREP (Preparation); USES (Uses)  
 (soluble 1,4-benzodiazepine compds. and stable salts thereof for dosage  
 forms for treatment of immune, hyperproliferative and inflammatory disorders)  
 RN 1010421-83-6 CAPLUS  
 CN Carbamic acid, N-[4-[7-chloro-3-[(3,4-diethylphenyl)methyl]-2,3-dihydro-2-oxo-1H-1,4-benzodiazepin-5-yl]phenyl]-, 2-(4-morpholinyl)  
 (1:1) (CA INDEX NAME)

単にフリー体から塩を合成した反応は基本的に CASREACT ファイルには収録されない

PAGE 1-A



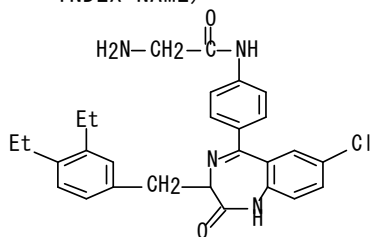
● HCl



CASREACT ファイルは、1991 年以降合成的に意義のある反応を主に収録

PAGE 2-A

RN 1010421-84-7 CAPLUS  
 CN Acetamide, 2-amino-N-[4-[7-chloro-3-[(3,4-diethylphenyl)methyl]-2,3-dihydro-2-oxo-1H-1,4-benzodiazepin-5-yl]phenyl]-, hydrochloride (1:1) (CA INDEX NAME)



● HCl



HITSTR 表示形式では、ヒットしたすべての CAS 登録番号に対する構造などが見れる

A 生成物を指定した検索

検索例 1

L6 ANSWER 242 OF 1478 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 1998:15623 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 128:114966  
 OREF 128:22545a,22548a  
 TI Apparatus and method for solid phase multiple simultaneous synthesis.  
 IN Dewitt, Sheila H. H.; Kell, Michael; Pavia, Michael R.; Kiely, John S.;  
 Schroeder, Mel C.; Stankovic, Charles J.; Ware, Steven  
 PA Warner-Lambert Co., USA  
 SO U.S., 52 pp., Cont.-in-part of U.S. 5,612,002.  
 CODEN: USXXAM  
 DT Patent  
 LA English  
 FAN. CNT 3

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 5702672	A	19971230	US 1995-540512	19951010
	US 5324483	A	19940628	US 1993-12557	19930202
	US 5324483	B1	19960924		
	US 5612002	A	19970318	US 1995-430696	19950428
	US 5565173	A	19961015	US 1995-461998	19950605
	US 5567391	A	19961022	US 1995-464161	19950605
	US 5582801	A	19961210	US 1995-463545	19950605
	US 5593642	A	19970114	US 1995-461475	19950605
	US 5766556	A	19980616	US 1996-777270	19961231
PRAI	US 1992-958383	B2	19921008		
	US 1993-12557	A3	19930202		
	US 1994-217347	B3	19940324		
	US 1995-430696	A2	19950428		

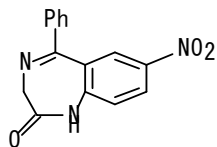
IT 146-22-5P 1088-11-5P 2011-67-8P 2898-08-0P 3432-80-2P 4699-82-5P  
 4928-07-8P 14404-96-7P 14646-64-1P 24083-83-8P 34099-62-2P 34124-69-1P  
 62775-28-4P 62775-29-5P 62775-32-0P 89141-65-1P 137404-89-8P 152236-68-5P  
 152236-69-6P 152236-83-4P 152236-84-5P 152236-86-7P 152236-87-8P 160448-78-2P  
 160448-85-1P 160448-86-2P 160448-87-3P 160448-88-4P 160448-89-5P 160448-90-8P  
 160448-91-9P 201473-78-1P 201474-62-6P 201474-63-7P 201474-64-8P 201474-65-9P  
 201474-66-0P 201474-68-2P 201474-69-3P 201474-70-6P

RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)  
 (apparatus and method for solid phase multiple simultaneous synthesis)

RN 146-22-5 CAPLUS

CN 2H-1,4-Benzodiazepin-2-one, 1,3-dihydro-

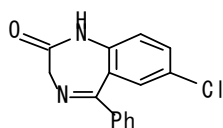
CASREACT ファイルは、化学的工業生産 (IMF) については、あまり収録していない



CASREACT ファイルは、ポリマーの重合反応や、工業的合成については、あまり収録していない

RN 1088-11-5 CAPLUS

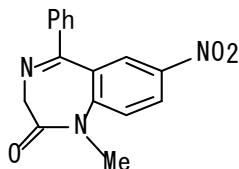
CN 2H-1,4-Benzodiazepin-2-one, 7-chloro-1,3-dihydro-5-phenyl- (CA INDEX NAME)



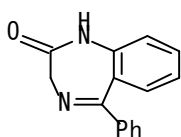
A 生成物を指定した検索

検索例 1

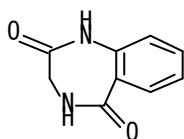
RN 2011-67-8 CAPLUS  
 CN 2H-1,4-Benzodiazepin-2-one, 1,3-dihydro-1-methyl-7-nitro-5-phenyl- (CA INDEX NAME)



RN 2898-08-0 CAPLUS  
 CN 2H-1,4-Benzodiazepin-2-one, 1,3-dihydro-5-phenyl- (CA INDEX NAME)



L6 ANSWER 1478 OF 1478 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 1931:4301 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN 25:4301  
 OREF 25:491c-i,492a-h  
 TI Comparative investigations on the cleavage of the CONH linkage in polypeptides and related compounds, in which the NH2 or COOH group is variously substituted, by dilute alkali, erepsin and trypsin-kinase  
 AU Abderhalden, Emil; Riesz, Eugen  
 SO Fermentforschung (1930), 12, 180-222  
 CODEN: FEFOAG; ISSN: 0367-2034  
 DT Journal  
 LA Unavailable  
 IT **5118-94-5P**, Anthranilic acid, N-glycyl-, lactam  
 RL: PREP (Preparation)  
 (preparation of)  
 RN 5118-94-5 CAPLUS  
 CN 1H-1,4-Benzodiazepine-2,5-dione, 3,4-dihydro- (CA INDEX NAME)



CASREACT ファイルは、収録開始年は古い  
 あまり古い合成情報は収録されていない  
 (2008年8月現在)

~ 1950年	9,217件	(レコード数)
1961 ~ 1970年	16,808件	
1971 ~ 1980年	39,589件	
1981 ~ 1990年	170,238件	
1991 ~ 2000年	162,580件	
2000 ~ 2008年	248,007件	



A 生成物を指定した検索

検索例 2

■ 検索例 2: ある構造を有する化合物の合成文献を調べる. 検索後, 2000 年以降の文献に限定したい

=> D HIS

(FILE 'HOME' ENTERED AT 17:51:37 ON 25 JUL 2008)

FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 17:52:07 ON 25 JUL 2008

L1 STRUCTURE UPLOADED  
L2 50 S L1  
L3 16696 S L1 FUL

FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 17:52:37 ON 25 JUL 2008

L4 1818 S L3/P

FILE 'CASREACT' ENTERED AT 17:52:51 ON 25 JUL 2008

L5 364 S L3/PRO

FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 17:54:22 ON 25 JUL 2008

L6 1478 S L4 NOT L5

=> S L4 OR L5

364 L5  
L7 1842 L4 OR L5



発行年 (/PY) で絞り込みたいときは, CAplus ファイルで  
まとめて絞り込むとよい.  
(CASREACT ファイルでは /PY は /PY.B に相当)

=> S L7 AND 2000<=PY ← 2000 年以降の文献に限定 (276 円)

9511714 2000<=PY  
L8 349 L7 AND 2000<=PY

=> D 1 130 BIB HITSTR ← 1 番目と 130 番目の回答を BIB HITSTR 表示形式で表示  
(488 円 × 2 = 976 円)

L8 ANSWER 1 OF 349 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN

AN 2008:675038 CAPLUS [Full-text](#)

DN 149:11872

TI Crosslinked polysaccharide derivatives and their uses for coating of  
chromatographic carriers or other substrate surfaces

TIJP 架橋多糖類誘導体. クロマトグラフィー担体か他の基板面のコーティングのための  
その使用 [機械翻訳]

IN Francotte, Eric; Zhang, Tong

PA Switz.

SO U.S. Pat. Appl. Publ., 24pp., Cont.-in-part of U.S. Ser. Number 983,392,  
abandoned.

CODEN: USXXCO

DT Patent

LA English

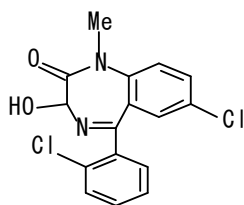
FAN. CNT 3

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	US 20080132695	A1	20080605	US 2008-31179	<b>20080214</b> <--
	WO 9704011	A1	19970206	WO 1996-EP3145	19960717
				:	
	JP 2008081745	A	20080410	JP 2007-290774	<b>20071108</b> <--

A 生成物を指定した検索

検索例 2

PRAI CH 1995-2160 A 19950721  
 CH 1996-1608 A 19960627  
 WO 1996-EP3145 W 19960717  
 US 1998-983392 B2 19980209  
 JP 1997-506291 A3 19960717  
 IT **848-75-9P**  
 RL: PUR (Purification or recovery); PREP (Preparation)  
 (separation; manufacture of crosslinked polysaccharide derivs. for coating  
 chromatog. carriers useful for enantiomer separation or other substrate  
 surfaces)  
 RN 848-75-9 CAPLUS  
 CN 2H-1,4-Benzodiazepin-2-one, 7-chloro-5-(2-chlorophenyl)-1,3-dihydro-3-  
 hydroxy-1-methyl- (CA INDEX NAME)



L8 ANSWER 130 OF 349 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 2004:346271 CAPLUS [Full-text](#)  
 DN **141:81693**  
 TI Cycloalkyl[b][1,4]benzodiazepinoindoles are agonists at the human 5-HT2C  
 receptor  
 TIJP シクロアルキル[b][1,4]ベンゾジアゼピノインドールはヒト5-  
 HT2C受容体のアゴニストである。 [機械翻訳]  
 AU Sabb, Annmarie L.; Vogel, Robert L.; Welmaker, Gregory S.; Sabalski, Joan  
 E.; Coupet, Joseph; Dunlop, John; Rosenzweig-Lipson, Sharon; Harrison,  
 Boyd  
 CS Chemical and Screening Sciences, Wyeth Research, Princeton, NJ,  
 08543-8000, USA  
 SO Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters (2004), 14(10), 2603-2607  
 CODEN: BMCLE8; ISSN: 0960-894X  
 PB Elsevier Science B.V.  
 DT Journal  
 LA English  
 OS CASREACT 141:81693  
 RE.CNT 8 THERE ARE 8 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT



CASREACT ファイルのみでヒットしたレコードは、  
 HITSTR 表示形式で構造は表示できない。  
 (なお表示していないので、この分の課金は生じない)

## A 生成物を指定した検索

### ReaxysFile ファイル



ReaxysFile ファイルで経済的に合成反応を調査する方法は、ありますか？

ReaxysFile ファイルでは、反応情報を検索できますが、検索方法によって課金が大きく異なります。ここでは、合成反応を経済的に検索できる方法をご紹介します。



- ReaxysFile ファイルは、有機化学分野における主要な化学構造およびファクト（物性）情報、有機化学反応情報を収録するデータベースである。

#### ■ 収録源

収録年代	物質数	収録情報	出典情報	収録源
1771-1959 年	約 110 万件以上	Handbook of Organic Chemistry 主編, 第 I-IV 増補編に対応	出典情報のノートに“Handbook Data”と記載	雑誌 特許* 単行本
1960-1979 年	約 300 万件以上	融点, 沸点, 密度, 屈折率, 天然物からの単離, 化学的誘導体についてのデータを収録	原文献の情報	雑誌 特許*
1980 年以降	約 510 万件以上	すべてのフィールドにデータと出典情報を収録	原文献の情報	雑誌

\* 特許の収録は、系統的ではない。

REGISTRY ファイルより、古い反応情報が収録されている  
ただし、特許の合成法はあまり収録されていない。

#### ■ 収録対象化合物：有機化合物および有機金属化合物

- ・ 構造既知化合物
- ・ 化学的または物理学的データの報告されている化合物
- ・ 炭素と金属原子が  $\sigma$  結合で結合している有機金属化合物
- ・ 生体分子（炭水化物、酵素、ホルモンなど）、混合物、ポリマー（2000 年以降）

#### ■ 未収録の炭素含有化合物

- ・ CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 炭酸塩
- ・  $\pi$  結合で配位している有機金属化合物（不飽和結合で配位している有機化合物と遷移金属との錯体）

## A 生成物を指定した検索

### ReaxysFile ファイル

#### ■ 物質レコードを検索するための検索機能

検索機能	網羅性	料金
CAS 登録番号	△	無料
REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索	(CAS 登録番号が収録されていないレコードがある)	1 化合物あたり 3 円
名称	△ (同義名などはあまり収録されていない)	無料
構造検索	◎	EXA, FAM 検索 4,000 円 CSS, SSS 検索 9,600 円



CAS 登録番号検索や、REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索、名称検索でヒットしなくても、構造検索ならば、ヒットする場合があります。

#### ■ 反応情報の表示

- ReaxysFile ファイルでは、反応情報がスキームとして表示されない

Reaction:  
RX

Reaction ID: 10240984  
 Reactant AN (.RAN): 878306, 605461  
 Reactant (.RCT): cyclohexanecarbaldehyde, ethynylbenzene, pyrrolidine  
 Product AN (.PAN): 9712189  
 Product (.PRO): 1-(1-cyclohexyl-3-phenyl-prop-2-ynyl)-pyrrolidine  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:  
RX

Reaction RID (.RID): 10240984.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 97 percent (AN=9712189)  
 Reagent (.RGT): gold(III) salen complex  
 Solvent (.SOL): H2O  
 Time (.TIM): 24 hour(s)  
 Temperature (.T): 40 Cel

参照文献情報が一緒に表示される

1. Lo, Vanessa Kar-Yan; Liu, Yungen; Wong, Man-Kin; Che, Chi-Ming, Org. Lett., CODEN: ORLEF7, SIR8(8), <2006>, 1529 - 1532; BABS-6559929

- 全反応の場合、また、反応物/生成物のみの反応であっても、すべて同じ料金 (880 円)
- 全データ表示と 20 データ表示、どちらも同じ料金なので、全データ表示のほうが経済的。

種類	反応情報の存在の確認	表示形式 全データ表示	表示形式 (20 データまで)
全反応 (反応物・生成物)	=> S RX/FA	=> D FRX	=> D RX
生成物の反応	=> S RXPRO/FA	=> D FRXPRO	=> D RXPRO
反応物の反応	=> S RXREA/FA	=> D FRXREA	=> D RXREA



物質があったとしても、反応情報が収録されているとは限らない。したがって、検索して反応情報の存在を確認してから、表示するとよい。

A 生成物を指定した検索

検索例 3

■ 検索例 3: 381218-99-1 の合成反応を ReaxysFile ファイルで調べる.

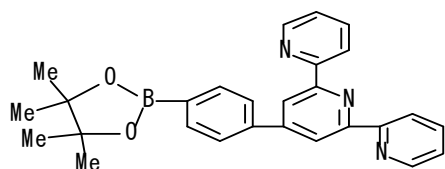
=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 381218-99-1 ← CAS 登録番号で検索する (無料)

L1 1 381218-99-1  
(381218-99-1/RN)

=> D ← デフォルトの IDE 表示形式 (260 円) で表示する

L1 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 RN **381218-99-1** REGISTRY  
 ED Entered STN: 09 Jan 2002  
 CN 2,2':6',2''-Terpyridine, 4'-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl]- (CA INDEX NAME)  
 MF C27 H26 B N3 O2  
 SR CA  
 LC STN Files: CA, CAPLUS, CASREACT, TOXCENTER



ReaxysFile ファイル  
の記述がない

\*\*PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT\*\*

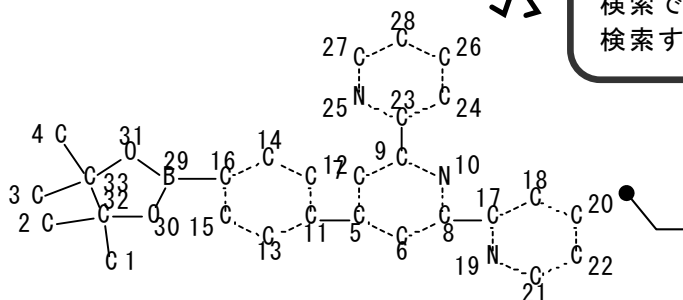
4 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)  
 4 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)

=> STR 381218-99-1

:DIS



ReaxysFile ファイルは、名称や CAS 登録番号検索、REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索で、必ずヒットするわけではないので、確実に検索する場合は構造検索を行う



作図画面で作図してもよいが  
STR コマンドを使うと簡単に  
作図できる

:END

L2 STRUCTURE CREATED

=> FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> S L2 EXA ← 完全一致検索のサンプル検索を行う (無料)

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
 BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED ITERATIONS: 1 TO 80  
 PROJECTED ANSWERS: 1 TO 80

L3 1 SEA EXA SAM L2



A 生成物を指定した検索

検索例 3

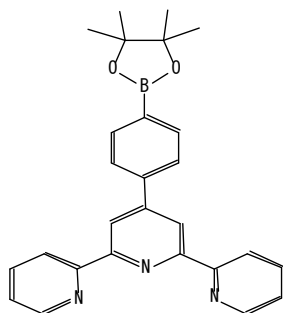
=> S L2 EXA FUL ← 完全一致検索のフルファイル検索を行う (4,000 円)  
 L4 1 SEA EXA FUL L2

=> S L4 AND RXPRO/FA ← 生成物である反応の存在を確認する (無料)  
 L5 1 L4 AND RXPRO/FA

=> D IDE FRXPRO ← 物質同定情報と、生成物であるすべての反応を表示する  
 (880 円 × 2 = 1,760 円)  
 L5 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2010 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 10713893  
 Chemical Name (CN): pinacol <4-(2,2':6',2''-terpyridin-4'-yl)phenyl>boronate  
 Autonom Name (AUN): 4'-<4-(4,4,5,5-tetramethyl-<1,3,2>dioxaborolan-2-yl)-phenyl>-<2,2';6',2''>terpyridine  
 Molec. Formula (MF): C27 H26 B N3 O2

参考



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1
CN	Chemical Name	1
AUN	Autonomname	1
MF	Molecular Formula	1
FW	Formular Weight	1
LN	Lawson Number	2
CTYPE	Compound Type	1
CONSID	Constitution ID	1
UTL	UTL	1



この方法で調べると、ReaxysFile ファイルは、化合物単位で反応情報を収録しているので、ある化合物に関する複数の合成情報があつた場合、経済的にまとめて表示できる

MP	Melting Point	1
MS	Mass Spectrum	2
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	5

This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	5
RXREA	Substance is Reaction Reactant	2
RXPRO	Substance is Reaction Product	3

A 生成物を指定した検索

検索例 3

Reaction:  
RX

Reaction ID (.ID): 10539102  
 Reactant AN (.RAN): 6339618, 7703552  
 Reactant (.RCT): 4'-(4-bromo-phenyl)-<2,2';  
 6',2''>terpyridine, 4,4,5,5,4',4',5',5'-  
 octamethyl-<2,2'>bi<<1,3,2>dioxaborolanyl>  
 Product AN (.PAN): 10741567, 10713893  
 Product (.PRO): C42H28N6, 4'-<4-(4,4,5,5-tetramethyl-  
 <1,3,2>dioxaborolan-2-yl)-phenyl>-<2,2';  
 6',2''>terpyridine  
 Number of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:  
RX

Reaction RID (.RID): 10539102.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 86 percent (AN=10741567)  
 Reagent (.RGT): K2CO3  
 Catalyst (.CAT): PdCl2(PPh3)2  
 Solvent (.SOL): dimethylsulfoxide  
 Time (.TIM): 6 hour(s)  
 Temperature (.T): 80 Cel  
 Reference(s):  
 1. Han, Fu She; Higuchi, Masayoshi; Kurth, Dirk G., Organic Lett., CODEN:  
 ORLEF7, SIR9(4), <2007>, 559 - 562; BABS-6646241

上の反応物, 生成物に対応  
する詳細な反応条件を収録

Reaction:  
RX

Reaction ID (.ID): 10539101  
 Reactant AN (.RAN): 6339618, 7703552  
 Reactant (.RCT): 4'-(4-bromo-phenyl)-<2,2';  
 6',2''>terpyridine, 4,4,5,5,4',4',5',5'-  
 octamethyl-<2,2'>bi<<1,3,2>dioxaborolanyl>  
 Product AN (.PAN): 10713893  
 Product (.PRO): 4'-<4-(4,4,5,5-tetramethyl-  
 <1,3,2>dioxaborolan-2-yl)-phenyl>-<2,2';  
 6',2''>terpyridine  
 Number of React. Details (.NVAR): 3

Reaction Details:  
RX

Reaction RID (.RID): 10539101.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 81 percent (AN=10713893)  
 Reagent (.RGT): PdCl2, dppf, KOAc  
 Solvent (.SOL): dioxane  
 Temperature (.T): 80 Cel  
 Reference(s):  
 1. Vrabel, Milan; Hocek, Michal; Havran, Ludek; Fojta, Miroslav; Votruba,  
 Ivan; Klepetarova, Blanka; Pohl, Radek; Rulisek, Lubomir; Zendlova,  
 Lucie; Hobza, Pavel; Shih, I.-Hung; et al., Eur. J. Inorg. Chemical,  
 CODEN: EJICFO(12), <2007>, 1752 - 1769; BABS-6660736

反応条件が複数存在する  
場合は, 反応条件ごとに  
分けて収録される  
【反応条件 1】

RX

Reaction RID (.RID): 10539101.2  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 42 percent (AN=10713893)  
 Reagent (.RGT): KOAc

【反応条件 2】

A 生成物を指定した検索

検索例 3

RX  
 Catalyst (.CAT): <1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene>palladium dichloride  
 Solvent (.SOL): dimethylsulfoxide  
 Time (.TIM): 6 hour(s)  
 Temperature (.T): 80 Cel  
 Reference(s):  
 1. Aspley, Catherine J.; Williams, J. A. Gareth, New J. Chemical, CODEN: NJCHE5, 25(9), <2001>, 1136 - 1147; BABS-6657637

RX  
 Reaction RID (.RID): 10539101.3  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 79 percent (AN=10713893)  
 Reagent (.RGT): KOAc  
 Catalyst (.CAT): Pd(dppf)2Cl2  
 Solvent (.SOL): dimethylsulfoxide  
 Temperature (.T): 80 Cel  
 Reaction Type (.TYP): Suzuki-Miyaura coupling  
 Reference(s):  
 1. Yuan, Si-Chun; Chen, Hai-Bo; Zhang, Yun; Pei, Jian, Organic Lett., CODEN: ORLEF7, SIR8(25), <2006>, 5701 - 5704; **BABS-6647806**

【反応条件 3】

RX  
 Reaction:  
 Reaction ID (.ID): 10505892  
 Reactant AN (.RAN): 6339618, 1906370  
 Reactant (.RCT): 4'-(4-bromo-phenyl)-<2,6',2''>terpyridine, 2-tetramethyl-<1,3,2>dioxaborolane  
 Product AN (.PAN): 10713893, 25534  
 Product (.PRO): 4'-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-<1,3,2>dioxaborolan-2-yl)-phenyl)-<2,2',6',2''>terpyridine, 4'-phenyl-<2,2',6',2''>terpyridine  
 Number of React. Details (.NVAR): 1

BABS ファイルで、この番号を検索すると、対応する書誌情報と抄録が表示される。  
 => FILE BABS  
 => S 6647806/AN

RX  
 Reaction Details:  
 Reaction RID (.RID): 10505892.1  
 Reaction Classification (.CL): Multistage  
 Nr. of Stages (.SNR): 2  
 Stage 1  
 Reagent (.RGT): C4H9Li  
 Temperature (.T): -78 - 20 Cel  
 Stage 2  
 Stage reactant (.SRCT): 2-isopropoxy-4,4,5,5-tetramethyl-[1,3,2]dioxaborolane  
 Stage Reactant AN (.SRAN): 1906370  
 Temperature (.T): -78 - 20 Cel  
 Reference(s):  
 1. Han, Fu She; Higuchi, Masayoshi; Kurth, Dirk G., Organic Lett., CODEN: ORLEF7, SIR9(4), <2007>, 559 - 562; BABS-6646241



CAplus/CA ファイル, CASREACT ファイルとの重複除去は、難しい (DUP REM コマンドや, L 番号のクロスオーバー検索ではできない)

A 生成物を指定した検索

検索例 3

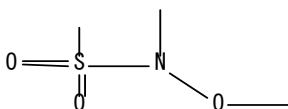
参考: ReaxysFile ファイルの ALLREF 表示形式

- ある物質の物性データよりも、収録されている文献情報を知りたい場合、ALLREF 表示形式を使えば、どの反応/物性フィールドにあっても、すべての文献情報を表示でき、経済的で便利。

=> D L1 1 IDE FBP FDEN FIR FNMR FRI ← どんな文献に載っているかを調べたいため、データの入っている物性データを全部指定 (880 円 X 6 = 5280 円)

L1 ANSWER 1 OF 1 REAXYSFILE COPYRIGHT 2010 Elsevier Properties SA. on STN

Accession Number (AN): 6474715  
 Chemical Name (CN): N-Mesyl-N, O-dimethylhydroxylamin  
 Autonom Name (AUN): N-methoxy-N-methyl-methanesulfonamide  
 Molec. Formula (MF): C3 H9 N O3 S  
 Molecular Weight (MW): 139.17



Field Availability:

Code	Name	Occurrence
AN	Accession Number	1

Nuclear Magnetic Resonance:  
NMR

Description (.KW): Chemical shifts  
 Nucleus (.NUC): 1H  
 Solvents (.SOL): acetone-d6  
 Reference(s):

- Boldhaus, Michael; Bliefert, Claus; Brink, Klaus; Mattes, Rainer, Z. Naturforsch. B Anorg. Chem. Org. Chem., CODEN: ZNBAD2, 36(12), <1981>, 1673-1674; BABS-5792776

文献情報

Boiling Point:

Value (BP) (Cel)	Press. (.P) (Torr)	Ref.
35	0.04	1

文献情報

Reference(s):

- Boldhaus, Michael; Bliefert, Claus; Brink, Klaus; Mattes, Rainer, Z. Naturforsch. B Anorg. Chem. Org. Chem., CODEN: ZNBAD2, 36(12), <1981>, 1673-1674; BABS-5792776

Liquid Density:

Value (DEN) (g/cm**3)	Temp. (.T) (Cel)	Ref. Temp. (.RT) (Cel)	Ref.
1.219	20	4	1

All References:  
ALLREF

**ALLREF 表示形式 (880 円) は参考文献だけまとめて表示**

- Boldhaus, Michael; Bliefert, Claus; Brink, Klaus; Mattes, Rainer, Z. Naturforsch. B Anorg. Chem. Org. Chem., CODEN: ZNBAD2, 36(12), <1981>, 1673-1674; BABS-5792776
- Brink, Klaus; Mattes, Rainer, Spectrochim. Acta Part A, CODEN: SAMCAS, 42(4), <1986>, 525-530; BABS-5782046

## B 反応検索

反応物と生成物を両方指定した検索には、同一反応内に指定して検索できる CASREACT ファイルが有効です。ReaxysFile ファイルでも、反応物と生成物を同一反応に限定した検索ができます。このような反応検索について紹介します。



## B 反応検索

### CASREACT, ReaxysFile, CAplus/CA ファイルの比較

#### ■ CASREACT, ReaxysFile, CAplus/CA ファイルの比較

2008 年 8 月現在

		CASREACT ファイル	CAplus ファイル	ReaxysFile ファイル
収録期間 (反応の収録期間)		1840 年以降 (同上)	1808 年以降 (1907 年以降) <sup>*1</sup>	1771 年以降 (同上)
収録源		雑誌, 特許	雑誌, 特許, 会議録, 技術レポート, 学位論文, 単行本	雑誌: 1771 年以降 特許: 1980 年代以前
反応総数		1,500 万 (一段階・多段階反応)	—	890 万 (主に一段階反応)
更新		毎週	毎日	年 4 回リロード <sup>*</sup>
レコード単位		文献単位	文献単位	物質単位/反応単位
収録内容	反応物	○	○	○
	生成物	○	○	○
	試薬	○	△ <sup>*2</sup>	○
	溶媒	○	△ <sup>*2</sup>	○
	触媒	○	△ <sup>*2</sup>	○
	反応条件	△ (2003 年以降)	×	○
検索機能	反応物	○ (構造, CAS 登録番号)	△ (/RCT で 1967 年以降)	○ (構造 <sup>*4</sup> , レコード番号)
	生成物	○ (構造, CAS 登録番号)	○ (/P で 1907 年以降)	○ (構造 <sup>*4</sup> , レコード番号)
	試薬	○ (CAS 登録番号)	△ <sup>*2</sup> (/RGT で 2002 年以降)	△ (名称, 分子式) <sup>*3</sup>
	溶媒	○ (CAS 登録番号)	△ <sup>*2</sup> (/CAT で 1967 年以降)	△ (名称, 分子式) <sup>*3</sup>
	触媒	○ (CAS 登録番号)	△ <sup>*2</sup> (/SOL で 1967 年以降)	△ (名称, 分子式) <sup>*3</sup>
	反応条件	×	×	△ (テキスト検索) <sup>*3</sup>
	その他	官能基検索 反応検索 (スキームを作図した検索)		
特徴	生成物や反応物, 溶媒, 触媒等を互いにリンクし て検索可能  反応図を表示できる	幅広く合成法を調べ ることができる 古い年代の文献も調査 可能	生成物と反応物を指定して 検索可能 古い年代の反応も調査可能 構造検索以外の検索料金は 無料	
備考	工業的反応やポリマーの 反応はあまり収録されて いない	汎用試薬や溶媒, 触媒 等は索引されていない 反応検索ができない (REGISTRY ファイルの 構造検索結果のクロス オーバー検索を利用)	構造質問式を用いた反応検 索はできない	

\*1 /P または CAS ロールの PREP で検索可能な期間

\*2 著者が強調している場合に索引

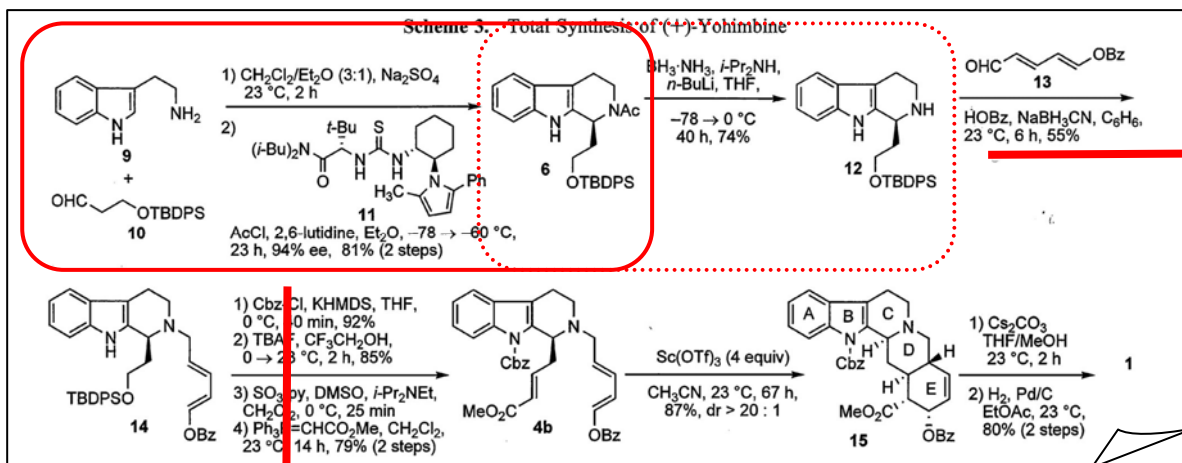
\*3 反応レコードのみで有効

\*4 物質レコードのみで有効

## B 反応検索

### CASREACT ファイルの反応情報

#### ■ CASREACT ファイルの反応情報： 反応ごとに整理して収録

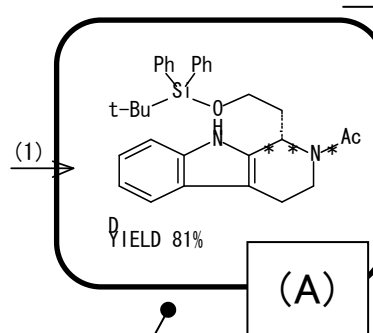
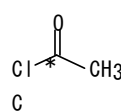
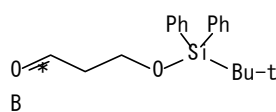
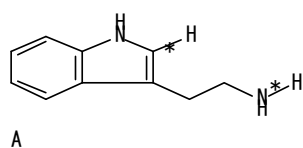


AN 148:355980 CASREACT Full-text

TI Catalytic Asymmetric Total Synthesis of (+)-Yohimbine

SO Organic Letters (2008), 10(5), 745-748

RX(1) OF 45 A + B + C ==> D...



RX(1) RCT A 61-54-1, B 112897-03-7

STAGE (1)

SOL 60-29-7 Et2O, 75-09-2 CH2Cl2

CON SUBSTAGE (1) 10 minutes, room temperature

SUBSTAGE (2) 1.5 hours, room temperature

生成物と収率は  
(A) 演算子

STAGE (2)

RGT E 7757-82-6 Na2SO4

CON 30 minutes, room temperature

STAGE (3)

CAT 764650-97-7 Butanamide, 3,3-dimethyl-2-[[[(1R,2R)-2-(2-methyl-5-phenyl-1H-pyrrol-1-yl)cyclohexyl]amino]thioxomethyl]amino]-N,N-bis(2-methylpropyl)-, (2S)-

SOL 60-29-7 Et2O

CON room temperature  $\rightarrow -78^\circ\text{C}$

STAGE (4)



CASREACT ファイルは、反応物、生成物のみならず、  
試薬、溶媒、触媒、反応条件 (2003 年以降) を収録

検索するには...

反応物・生成物・試薬 : CAS 登録番号, 構造  
溶媒, 触媒 : CAS 登録番号

PRO D 1011533-72-4

NTE acyl Pictet-Spengler reaction, stereoselective

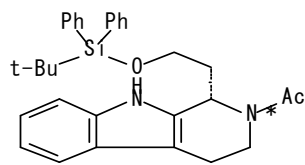
(L)



## B 反応検索

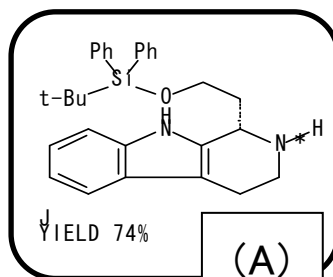
### CASREACT ファイルの反応情報

RX (2) OF 45 ... D ==> J...



D

(2) →



(A)

RX (2)

STAGE (1)

RGT K 109-72-8 BuLi, L 108-18-9 i-Pr2NH  
 SOL 109-99-9 THF, 110-54-3 Hexane  
 CON SUBSTAGE (1) 15 minutes, -78 deg C  
 SUBSTAGE (2) -78 deg C → 0 deg C  
 SUBSTAGE (3) 25 minutes, 0 deg C



一つのレコード (文献) 中に、複数の反応が収録されている場合があるので、同一反応に限定する場合は (L) を用いる。

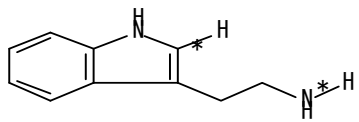
AND 演算子は、レコード全体

(L)

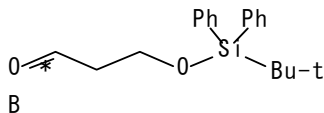
PRO J 1011533-73-5

RX (18) OF 45 COMPOSED OF RX (1), RX (2), RX (3)

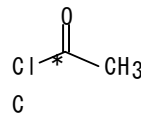
RX (18) A + B + C + R ==> S



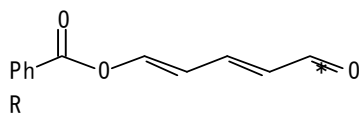
A



B

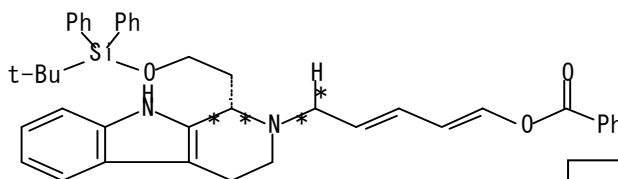


C



R

3 STEPS →



YIELD 55%

(L)

多段階反応の全体の収率ではなく、最終反応ステップの収率が表示される。

RX (1) RCT A 61-54-1, B 112897-03-7

STAGE (1)

SOL 60-29-7 Et2O, 75-09-2 CH2Cl2  
 CON SUBSTAGE (1) 10 minutes, room temperature



CASREACT ファイルでは、一段階反応だけでなく、多段階反応も収録。全合成などの複数の反応ステップを必要とする検索も、簡単にできる

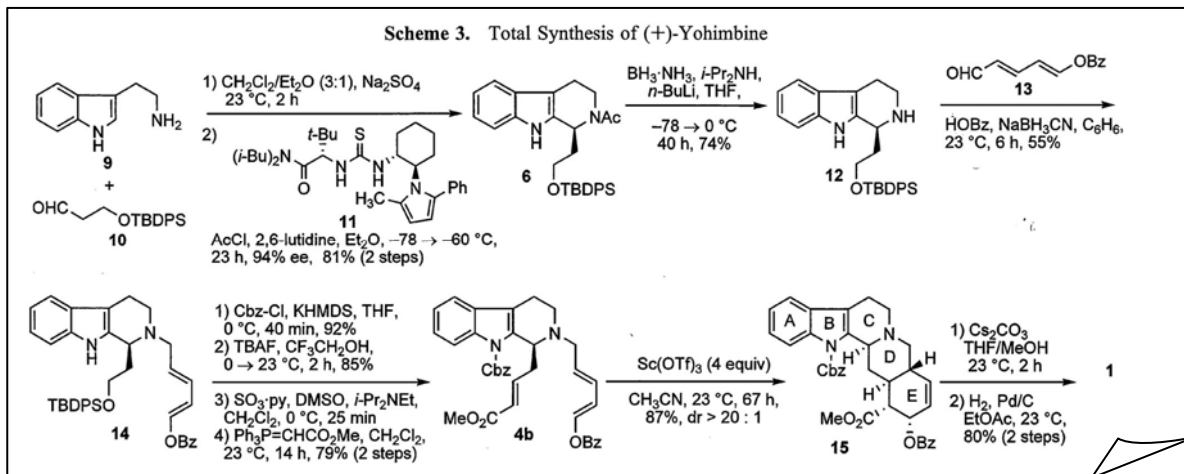
CON 30 minutes, room temperature

STAGE (3)

## B 反応検索

### CAplus/CA ファイルの反応情報

#### ■ CAplus/CA ファイルの反応情報： 反応物, 中間体, 生成物に分けて索引



TI Catalytic Asymmetric Total Synthesis of (+)-Yohimbine

TIJP (+)-ヨヒンビンの触媒不斉全合成 [機械翻訳]

S0 Organic Letters (2008), 10(5), 745-748

IT Diels-Alder reaction

(intramol  
enantiose  
Diels-Ald



CAplus/CA ファイルでは、著者が論文中で強調していない限り、  
溶媒、触媒、試薬については索引しない

IT Transition s

(relative energies  
structures)

収率・反応条件についても索引しない

IT 764650-97-7

(L)

RL: **CAT (Catalyst use)**; USES (Uses)

(asym. synthesis of (+)-yohimbine via an enantioselective acyl-Pictet-Spengler reaction and intramol. Diels-Alder reaction.)

IT 61-54-1, 1H-Indole-3-ethanamine 2605-67-6 24338-67-8 112897-03-7

(L)

RL: **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)

(asym. synthesis of (+)-yohimbine via an enantioselective acyl-Pictet-Spengler reaction and intramol. Diels-Alder reaction.)

IT 1011533-71-3P 1011533-72-4P 1011533-73-5P 1011533-74-6P  
1011533-75-7P 1011533-76-8P 1011533-77-9P 1011533-78-0P

(L)

RL: **RCT (Reactant)**; **SPN (Synthetic preparation)**; **PREP (Preparation)**;

RACT (Reactant or reagent)

(asym. synthesis of (+)-yohimbine via an enantioselective acyl-Pictet-Spengler reaction and intramol. Diels-Alder reaction.)

IT 146-48-5P

(L)

RL: **SPN (Synthetic preparation)**; **PREP (Preparation)**

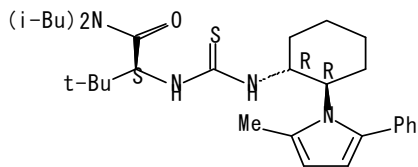
(asym. synthesis of (+)-yohimbine via an enantioselective acyl-Pictet-Spengler reaction and intramol. Diels-Alder reaction.)

## B 反応検索

### CAplus/CA ファイルの反応情報

RN 764650-97-7

触媒



AND 演算子は、  
レコード全体

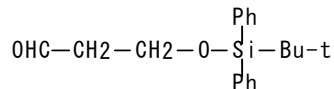
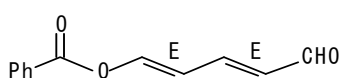
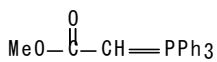
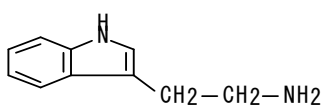
RN 61-54-1

RN 2605-67-6

RN 24338-67-8

RN 112897-03-7

原料

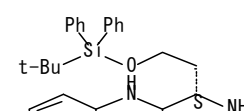
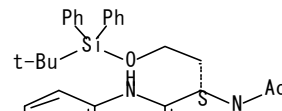
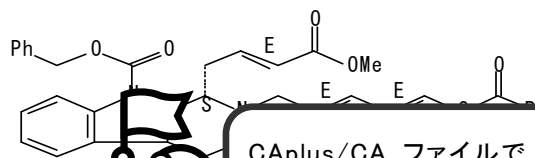


RN 1011533-71-3

RN 1011533-72-4

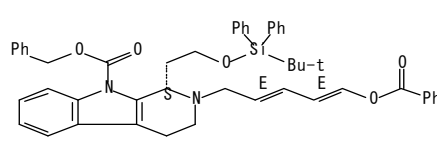
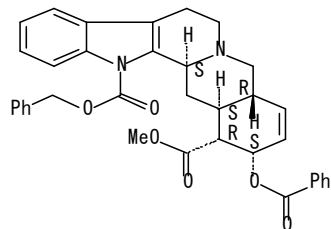
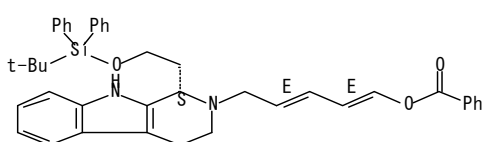
RN 1011533-73-5

中間体

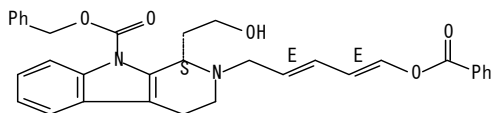


CAplus/CA ファイルで、二つ以上の反応関与物質を用いて検索するには、対応するロールを指定して、AND 演算子で検索する  
原料同士、中間体同士、生成物同士も AND 演算子で検索する

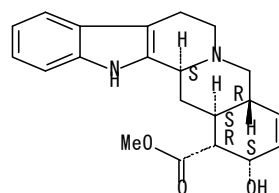
RN 1011533-74-6



RN 1011533-77-9

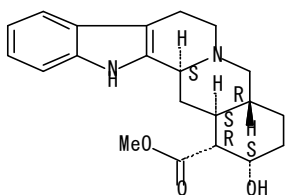


RN 1011533-78-0



RN 146-48-5

最終生成物



物質ごとに索引されるため、反応経路を指定した検索はできない

## B 反応検索

### CASREACT ファイルの検索

- CASREACT ファイルでは、反応物と生成物を (L) 演算子でリンクさせることにより、同一反応内に限定して検索できる。

=> S 反応物の CAS 登録番号/RCT (L) 生成物の CAS 登録番号/PRO

- ・ CAS 登録番号の代わりに、REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号を利用することもできる (回答セットは、構造検索の結果でも辞書検索の結果でもどちらでもよい)。

- 反応関与物質のロール

ロール		内容
/RRT	/RCT	反応物 (Reactant)
	/RGT	試薬 (Reagent)
/PRO		生成物 (Product)
/SOL*		溶媒 (Solvent)
/CAT*		触媒 (Catalyst): ANY/CAT で触媒反応に限定可能

\* 溶媒と触媒の指定は、CAS 登録番号でのみ可能

- 反応検索に組み合わせ可能な主な項目

項目	フィールド	入力例	備考
収率	/YD	=> S 80=<YD	/YD は数値検索フィールド NONE/YDT は収率情報なし
	/YDT	=> S NONE/YDT	
反応のステップ数	/NS	=> S 1/NS	/NS は数値検索フィールド
反応ノート	/NTE	=> S ENZYM?/NTE	酵素反応や立体選択的反応などで限定できる
CA の一部の書誌情報 雑誌名 資料種類など	/JT	=> S SYNTHESIS/JT	
	/DT	=> S P/DT	



#### CASREACT ファイルの演算子の範囲

- ・ 同一反応に限定する場合 => (L) 演算子を利用する。
  - 反応ステップ数 (NS) や触媒の存在 (ANY/CAT) も (L) 演算子を用いる。
- ・ 収率 (/YD) と生成物をリンクする場合: (A) 演算子を利用する。
  - NONE/YDT を OR 演算すると、収率情報のないレコードも含めることができる。
  - 入力例: => S 106-47-8/RCT (L) 100-00-5/PRO (A) (90<=YD OR NONE/YDT
  - 生成物以外と収率 (/YD) をリンクする場合は (L) 演算子を用いる。
- ・ CA ファイルの文献情報とリンクする場合は: AND 演算子を利用する。

## B 反応検索

### CASREACT ファイルの検索

#### ■ 演算子利用の注意点

CASREACT ファイルは 1 文献が 1 レコードのため、1 レコード中に複数の反応を収録していることがある。したがって、反応情報（生成物や反応物、収率など）同士をリンクする際に、AND 演算子を用いるとノイズが含まれる場合がある。同一反応中に限定する場合は（L）演算子を用いる。

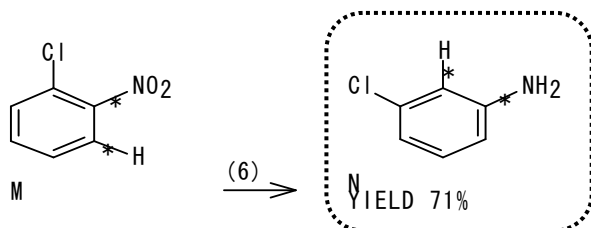
=> FILE CASREACT

=> S 121-73-3/RCT AND 108-42-9/PRO ← 反応物と生成物を AND 演算する  
L1 79 121-73-3/RCT AND 108-42-9/PRO

=> D 39 BIB SSRX ← 39 件目の書誌情報とすべての一段階反応を表示する (691 円)

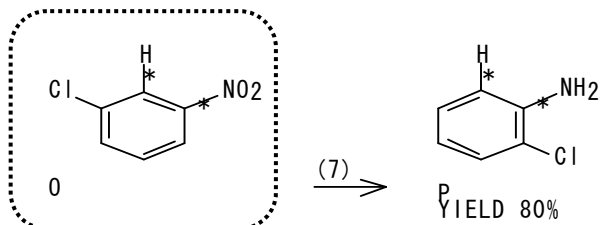
L1 ANSWER 39 OF 79 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
AN 139:68997 CASREACT Full-text  
TI Preparation of aromatic amines by reduction of aromatic nitro compounds with metallic tellurium in near-critical water  
:

RX (6) OF 12 M ==> N ← 生成物のみヒット



RX (6) RCT M 88-73-3  
RGT C 13494-80-9 Te  
PRO N **108-42-9**  
SOL 7732-18-5 Water  
CON 5 hours, 275 deg C  
NTE chemoselective, green chemical-solvent, optimization, water solvent

RX (7) OF 12 O ==> P ← 反応物のみヒット



RX (7) RCT O **121-73-3**  
RGT C 13494-80-9 Te  
PRO P 95-51-2  
SOL 7732-18-5 Water  
CON 5 hours, 275 deg C  
:

AND 演算子を用いたため、異なる反応でヒットしている

## B 反応検索

### CASREACT ファイルの検索

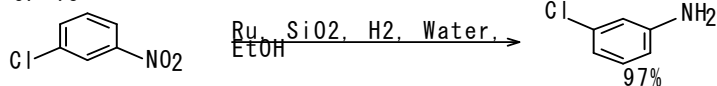
- 検索例：3-クロロニトロベンゼン (121-73-3) から 3-クロロアニリン (108-42-9) を得る反応

=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る  
=> S 121-73-3/RCT (L) 108-42-9/PRO ← 反応物と生成物を (L) 演算子でリンクして  
L1 78 121-73-3/RCT (L) 108-42-9/PRO 検索する (1,860 円)  
=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L1 78 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN

TI Method for synthesis of chloroaniline by selective hydrogenation of chloronitrobenzene in alcohol-water

RX(4) OF 13



NOTE: chemoselective

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D 1 78 BIB FHIT ← 1 番目と 78 番目の書誌情報とヒットした  
最初の反応を表示する (450×2 = 900 円)

L1 ANSWER 1 OF 78 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN

AN 149:104482 CASREACT Full-text

TI Method for synthesis of chloroaniline by selective hydrogenation of chloronitrobenzene in alcohol-water

IN Xu, Jie; Ning, Jianbo

PA Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Peop. Rep. China

SO Faming Zhuanli Shenqing Gongkai Shuomingshu, 10pp.

CODEN: CNXXEV

DT Patent

LA Chinese

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	CN 101195579	A	20080611	CN 2006-10144344	20061204
PRAI	CN 2006-10144344		20061204		



反応物や生成物の指定に REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号を利用する場合は、クロスオーバー料金が高額であるため、注意する (3,860 円/L 番号).

使い分けのめやす

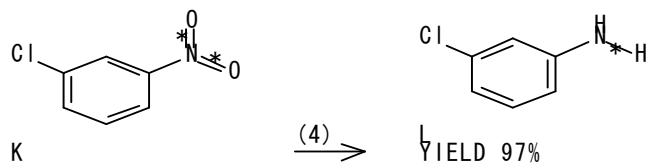
4 物質以下の場合 ⇒ CASREACT ファイルで CAS 登録番号に直接ロールを指定する (930 円/CAS 登録番号)

5 物質以上の場合 ⇒ REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号にロールを指定する (3,860 円/L 番号)

## B 反応検索

### CASREACT ファイルの検索

RX (4) OF 13 K ==> L



RX (4)

RCT K 121-73-3  
 RGT C 1333-74-0 H2  
 PRO L 108-42-9  
 CAT 7740-18-8 Ru, 7631-86-9 SiO2  
 SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH  
 CON 25 minutes, 100 deg C  
 NTE chemoselective

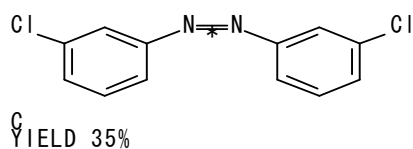
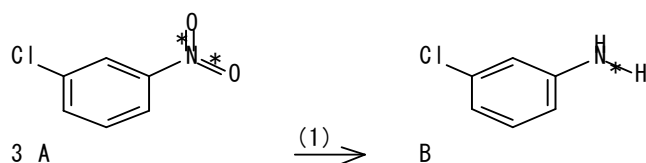
反応物と生成物を (L) 演算子でリンクしたので、同一反応中でヒットしている



CASREACT ファイルでは、“同一反応中”を指定した検索ができる

L1 ANSWER 78 OF 78 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 32:35645 CASREACT Full-text  
 TI Alkanolamines. IV. Reducing properties of the amino alcohols  
 AU Kremer, Chester B.; Kress, Bernard  
 SO Journal of the American Chemical Society (1938), 60, 1031-2  
 CODEN: JACSAT; ISSN: 0002-7863  
 DT Journal  
 LA Unavailable

RX (1) OF 2 3 A ==> B + C



RX (1) RCT A 121-73-3  
 RGT D 141-43-5 HOCH2CH2NH2, E 497-19-8 Na2CO3  
 PRO B 108-42-9, C 106131-20-8  
 NTE Classification: Reduction; # Conditions: H2NCH2CH2OH; Na2CO3;  
 heat 6h; # Comments: Yield of dimeric by-product not specified

## B 反応検索

### CASREACT ファイルの検索

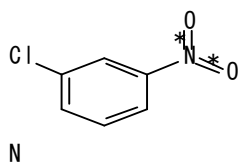
- CASREACT ファイルでは, (L) 演算子を用いて, 収率 (/YD, /YDT), 試薬 (/RGT), 触媒 (/CAT), 溶媒 (/SOL) などの条件でさらに絞り込むことができる.

=> S L1 (L) (80<=YD OR NONE/YDT) ← 収率で限定する (262×2=524 円)  
L2 69 L1 (L) (80<=YD OR NONE/YDT)

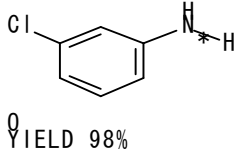
=> D 10 FHIT

L2 ANSWER 10 OF 69 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN

RX(6) OF 14 N ==> 0



(6) →



CASREACT ファイルでは,  
収率を検索できる

RX(6) RCT N **121-73-3**  
RGT C 7803-57-8 N2H4-H2O  
PRO O **108-42-9**  
CAT 11115-92-7 Iron hydroxide oxide  
SOL 67-63-0 Me2CHOH  
CON 30 minutes, reflux  
NTE chemoselective, green chemical, solid-supported reagent

収率が 80% 以上あるいは収率情報の  
ないレコードに限定されている

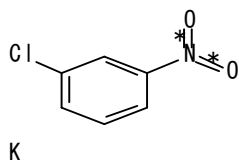
=> S L1 (L) 7440-18-8/CAT  
L3 2 L1 (L) 7440-18-8/CAT

← ルテニウム (7440-18-8) を触媒として用いた  
反応に限定する (930 円)

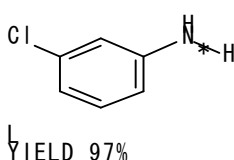
=> D FHIT

L3 ANSWER 1 OF 2 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN

RX(4) OF 13 K ==> L



(4) →



CASREACT ファイルでは,  
合成に係る触媒・溶媒も  
検索できる

RX(4) RCT K **121-73-3**  
RGT C 1333-74-0 H2  
PRO L **108-42-9**  
CAT **7440-18-8** Ru, 7631-86-9 SiO2  
SOL **7732-18-5** Water, 64-17-5 EtOH  
CON 25 minutes, 100 deg C  
NTE chemoselective

ひとつの反応情報中で,  
ルテニウムを触媒として用  
いた反応がヒットしている



## B 反応検索

### CAplus/CA ファイルの検索

- CAplus/CA ファイルでは、CASREACT ファイルの収録対象には含まれていない年代や分野の文献情報も含めて幅広く検索できる。
- 化学物質は CAS 登録番号で索引 (IT) フィールドに索引されているので、生成物や反応物を指定した検索を実行するには、REGISTRY ファイルで物質を検索した回答セットの L 番号に /P や CAS ロールをつけて検索する (REGISTRY ファイルの回答セットは、構造検索の結果でも辞書検索の結果でもどちらでもよい)。
- 反応物と生成物は AND 演算で組み合わせる。

=> S 反応物の L 番号/RCT AND 生成物の L 番号/P

\* L 番号は REGISTRY ファイルの回答セット

- 反応文献検索に用いる主な CAS ロール

ロール	内容	備考
/RACT	反応物または試薬	/RCT, /RGT を含む上位のスーパーロール
/RCT	反応物 (Reactant)	1967 年以降のレコードに付与
/RGT	試薬 (Reagent)	2002 年以降のレコードに付与
/PREP	生成物 (Product)	CAS 登録番号に対する接尾辞 P と対応 1907 年以降のレコードに付与
/BMF	生化学的工業生産	1967 年以降のレコードに付与
/BPN	生化学的合成	
/BYP	副生成物 (By-product)	
/CPN	コンビナトリアル・ケミストリーによる合成	2002 年以降のレコードに付与
/IMF	化学的工業生産	1967 年以降のレコードに付与
/PUR	精製	
/SPN	化学合成	
/PNU	上記以外の製造	1967 - 2006 年のレコードに付与
/CAT	触媒 (Catalyst)	1967 年以降のレコードに付与



CAplus/CA ファイルで、CAS 登録番号に CAS ロールを付けて検索すると、CAS 登録番号に対しても検索語料が課金される。REGISTRY ファイルからのクロスオーバー検索を用いた方が経済的に検索できる。

=> S 121-73-3/RCT AND 108-42-9/PREP (276 × 4 語分 = 1,104 円課金)



## B 反応検索

### CAPLUS/CA ファイルの検索

L6 ANSWER 138 OF 138 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 1968:106409 CAPLUS Full-text  
 DN 68:106409  
 OREF 68:20579a,20582a  
 TI Development of industrial technology for catalytic liquid-phase reduction of aromatic nitro compounds under pressure and the construction of a contact apparatus  
 AU Ovchinnikov, P. N.; Bat, I. I.; Chistyakova, G. A.; Utkin, A. V.  
 SO Khimicheskaya Promyshlennost (Moscow, Russian Federation) (1968), 44(3), 215-16  
 CODEN: KPRMAW; ISS **CAS ロール (/RCT) を使っているので、1967 年以降の文献に限定される**  
 DT Journal  
 LA Russian  
 CC 48 (Unit Operations and Processes)  
 IT 95-53-4P 95-76-1P 106-47-8P **108-42-9P** 1300-73-8P  
 RL: PREP (Preparation)  
 (manufacture of, by reduction)  
 IT 88-72-2 98-95-3, reactions 99-54-7 100-00-5 **121-73-3**  
 25168-04-1  
 RL: **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)  
 (reduction of)

=> D 83 BIB HITIND

← 83 番目の書誌情報とヒットした索引情報を表示する (204 円)

L6 ANSWER 83 OF 138 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 1995:586434 CAPLUS Full-text  
 DN 122:314266  
 OREF 122:57149a,57152a  
 TI Process for the reductive halogenation of aromatic nitro or nitroso compounds to haloaromatic amines  
 IN Tordeux, Marc; Wakselman, Claude  
 PA Rhone-Poulenc Chimie SA, Fr.  
 CC 25-4 (Benzene, Its Derivatives, and Compounds)  
 Section cross-reference(s): 22  
 IT 62-53-3P, Aniline, preparation 88-17-2  
 91-59-8P, 2-Aminonaphthalene 95-51-2  
 2-Methylaniline, preparation 98-16-8  
**108-42-9P**, 3-Chloroaniline 108-44-1P, 3-Methylaniline, preparation 348-54-9P, 2-Fluoroaniline  
 RL: BYP (Byproduct); PREP (Preparation)  
 (process for the reductive halogenation of aromatic nitro or nitroso compds. to haloarom. amines)  
 IT 88-72-2, 2-Methylnitrobenzene 88-73-3, 2-Chloronitrobenzene 98-46-4, 3-Trifluoromethylnitrobenzene 98-95-3, Nitrobenzene, reactions 99-08-1, 3-Methylnitrobenzene 99-99-0, 4-Methylnitrobenzene 100-00-5, 4-Chloronitrobenzene **121-73-3**, 3-Chloronitrobenzene 384-22-5, 2-Trifluoromethylnitrobenzene 581-89-5, 2-Nitronaphthalene 586-96-9, Nitrosobenzene 1493-27-2, 2-Fluoronitrobenzene 7439-92-1, Lead, reactions 7440-02-0, Nickel, reactions 7440-21-3, Silicon, reactions 7440-31-5, Tin, reactions 7440-48-4, Cobalt, reactions 7440-56-4, Germanium, reactions 7440-69-9, Bismuth, reactions 7440-74-6, Indium, reactions  
 RL: **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)  
 (process for the reductive halogenation of aromatic nitro or nitroso compds. to haloarom. amines)

芳香族ニトロ化合物の還元ハロゲン化による  
ハロゲン化芳香族アミンの合成反応

↓  
ノイズ

反応物と生成物はそれぞれ別の索引フィールドに索引されているが、検索式では、反応物と生成物を AND 演算子で組み合わせるため、同一反応内に限定することはできない。よって、検索結果にはノイズが含まれることもある。

## B 反応検索

### CAplus/CA ファイルの検索

=> S L6 NOT L1 ← CAplus ファイルでのみヒットした回答に限定  
L7 66 L6 NOT L1

=> D 1 BIB HITIND ← 1 番目の書誌情報とヒットした索引情報を表示する (204 円)

L7 ANSWER 1 OF 66 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
AN 2008:643668 CAPLUS  
DN 149:81631  
TI MCM-41-Supported Organometallic-Derived Nanopalladium as a Selective Hydrogenation Catalyst  
TIJP 選択的な水素化触媒としてのMCM-41担持有機金属由来ナノパラジウム [機械翻訳]  
AU Maity, Niladri; Rajamohanam, Pattuparambil R.; Ganapathy, Subramanian; Gopinath, Chinnakonda S.; Bhaduri, Sumit; Lahiri, Goutam Kumar  
CS Department of Chemistry, Indian Institute of Technology-Bombay, Powai, Mumbai, 400076, India  
SO Journal of Physical Chemistry C (2008), 112(25), 9428-9433  
CODEN: JPCCCK; ISSN: 1932-7447  
PB American Chemical Society  
DT Journal  
LA English  
CC 45-4 (Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes)  
Section cross-reference(s): 67  
IT 95-51-2P, o-Chloroaniline 108-42-9P, m-Chloroaniline  
RL: IMF (Industrial manufacture); PREP (Preparation)  
(MCM-41-supported organometallic-derived nanopalladium as a selective hydrogenation catalyst)  
IT 88-73-3, o-Chloronitrobenzene 107-15-3, Ethylenediamine, reactions 121-73-3, m-Chloronitrobenzene  
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
(MCM-41-supported organometallic-derived nanopalladium as a selective hydrogenation catalyst)  
RE. CNT 28 THERE ARE 28 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

CASREACT ファイルにはあまり収録のない工業的合成の分野のレコードが得られた

- CAplus ファイルでは、CAS ロールを使って触媒用途を指定できる。ただし、同一文献中になる(同一反応中の指定はできない)。

=> FILE REGISTRY ← REGISTRY ファイルに入る

=> S 7440-18-8 ← 限定したい触媒の CAS 登録番号を検索する (無料)  
L8 1 7440-18-8  
(7440-18-8/RN)

=> FILE CAPLUS ← CAplus ファイルに入る

=> S L6 AND L8/CAT ← /CAT で触媒用途に限定する (276 円)  
L9 7 L6 AND L8/CAT

=> D 5 BIB HITIND ← 5 番目の書誌情報とヒットした索引情報を表示する (204 円)

L9 ANSWER 5 OF 7 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
AN 2004:443161 CAPLUS  
DN 141:313931  
TI Selective hydrogenation of halonitroaromatic compounds catalyzed by water-soluble bimetallic catalyst containing ruthenium and platinum

## B 反応検索

### CAplus/CA ファイルの検索

TIJP 水溶性二元金属触媒含有ルテニウムと白金による触媒のhalonitroaromatic化合物の選択的水素化 [機械翻訳]

- CC 25-4 (Benzene, Its Derivatives, a ルテニウム (7440-18-8) の触媒的利用  
Section cross-reference(s): 67
- IT 57-09-0, Ctab 7440-18-8, Ruthenium, uses 7447-39-4, Cupric chloride, uses 7646-79-9, Cobalt dichloride, uses 7647-10-1, Palladium dichloride 7705-08-0, Ferric chloride, uses 7718-54-9, Nickel dichloride, uses 7772-99-8, Stannous chloride, uses 10025-73-7, Chromic trichloride 16941-12-1 63995-70-0, TPPTS  
RL: **CAT (Catalyst use)**; USES (Uses)  
(selective hydrogenation of halonitroarom. compds. catalyzed by water-soluble bimetallic catalyst containing ruthenium and platinum)
- IT 88-73-3, 2-Chloronitrobenzene 89-61-2, 2,5-Dichloronitrobenzene 100-00-5, 4-Chloronitrobenzene 121-73-3, 3-Chloronitrobenzene 585-79-5, 3-Bromonitrobenzene  
RL: **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)  
(selective hydrogenation of halonitroarom. compds. catalyzed by water-soluble bimetallic catalyst containing ruthenium and platinum)
- IT 95-51-2P, 2-Chloroaniline 95-82-9P, 2,5-Dichloroaniline 106-47-8P, 4-Chloroaniline, preparation 108-42-9P, 3-Chloroaniline 591-19-5P, 3-Bromoaniline  
RL: **SPN (Synthetic preparation)**; PREP (Preparation)  
(selective hydrogenation of halonitroarom. compds. catalyzed by water-soluble bimetallic catalyst containing ruthenium and platinum)

■ CAplus ファイルでは、合成法に関する CAS ロールを利用できる。

- => S L6 AND L5/SPN ← 生成物を化学合成に限定する (276 円)  
L10 105 L6 AND L5/SPN
- => D 3 BIB HITIND ← 3 番目の書誌情報とヒットした索引情報を表示する (204 円)
- L10 ANSWER 3 OF 105 CAPLUS COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
AN 2007:1463002 CAPLUS  
DN 148:241273  
TI Clean production of chloroanilines by selective gas phase hydrogenation over supported Ni catalysts  
TIJP 担持Ni触媒の上の選択的気相水素化によるクロロアニリンのクリーン生産 [機械翻訳]
- CC 45-4 (Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes)  
Section cross-reference(s): 25, 67
- IT 88-73-3, o-Chloronitrobenzene 100-00-5, p-Chloronitrobenzene 121-73-3, m-Chloronitrobenzene 586-78-7, p-Bromonitrobenzene  
RL: PRP (Properties); **RCT (Reactant)**; RACT (Reactant or reagent)  
(clean production of haloanilines by selective gas phase hydrogenation of halonitrobenzenes over supported nickel catalysts)
- IT 71-43-2P, Benzene, preparation 95-51-2P, o-Chloroaniline 98-95-3P, Nitrobenzene, preparation 106-40-1P, p-Bromoaniline 106-47-8P, p-Chloroaniline, preparation 108-42-9P, m-Chloroaniline  
RL: **SPN (Synthetic preparation)**; PREP (Preparation)  
(clean production of haloanilines by selective gas phase hydrogenation of halonitrobenzenes over supported nickel catalysts)
- RE. CNT 72 THERE ARE 72 CITED REFERENCES AVAILAB 化学合成 (SPN) でヒットしている  
ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

## B 反応検索

### ReaxysFile ファイルの検索

■ ReaxysFile ファイルには、反応情報が 2 通りの方法で収録されている。

- ・ 化学物質レコード: 化学物質の情報とともに合成・反応情報が収録されているレコード
  - レコードは化学物質単位: 一つの化学物質に関する反応を複数表示しても 1 表示料金
- ・ 反応レコード: 反応情報が一つ一つ収録されているレコード
  - レコードは反応単位: 1 反応あたり 1 表示料金 (表示形式は RX 表示形式)

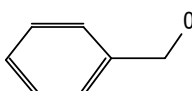
CAS 登録番号  
化学物質名称 等から検索  
構造式

反応物・生成物  
反応条件  
等から検索

化学物質レコード

反応レコード

Accession Number (AN): 878307  
Basic Pref. RN (BPR): 100-51-6  
CAS Reg. No. (RN): 100-51-6  
Chemical Name (CN): phenylmethanol, benzyl alcohol, Benzylalkohol, benzenemethanol

: 

: This substance also occurs in Reaction Documents:

Code	Name	Occurrence
RX	Reaction Documents	1092
RXREA	Substance is Reaction Reactant	9698
RXPRO	Substance is Reaction Product	1231

Reaction:  
RX  
Reaction ID (.ID): 10812149  
Reactant AN (.RAN): 471223, 635639  
Reactant (.RCT): benzaldehyde, propan-2-ol  
Product AN (.PAN): 2044384, 878307  
Product (.PRO): benzoic acid isopropyl ester, phenylmethanol  
No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:  
RX  
Reaction RID (.RID): 10812149.1  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Reagent (.RGT): K2CO3

Reaction:  
RX  
Reaction ID (.ID): 10811933  
Reactant AN (.RAN): 1361395, 471223  
Reactant (.RCT): but-2t-en-1-ol, benzaldehyde  
Product AN (.PAN): 4305606, 878307, 4841028  
Product (.PRO): (E)-Crotylbutanoate, phenylmethanol, trans-2-butenyl benzoate  
No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction:  
RX  
Reaction ID (.ID): 10812149  
Reactant AN (.RAN): 471223, 635639  
Reactant (.RCT): benzaldehyde, propan-2-ol  
Product AN (.PAN): 2044384, 878307  
Product (.PRO): benzoic acid isopropyl ester, phenylmethanol  
No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:  
RX  
Reaction RID (.RID): 10812149.1  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Reagent (.RGT): K2CO3  
Catalyst (.CAT):  
Time (.TIM):  
Temperature (T):  
Reference(s):  
1. Kiyooka, Syun-ichi; Wada, Yosuke; Ueno, Mahuyu; Yokoyama, Takeshi; Yokoyama, Reiko, Tetrahedron, CODEN: TETRA, 63(51), <2007>, 12695 - 12701; BABS-6717870

Reaction:  
RX  
Reaction ID (.ID): 10811933  
Reactant AN (.RAN): 1361395, 471223  
Reactant (.RCT): but-2t-en-1-ol, benzaldehyde  
Product AN (.PAN): 4305606, 878307, 4841028  
Product (.PRO): (E)-Crotylbutanoate, phenylmethanol, trans-2-butenyl benzoate  
No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:  
RX  
Reaction RID (.RID): 10811933.1  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Yield (.YDT): 10 percent (AN=4305606), 42 percent (AN=878307), 9 percent (AN=4841028)  
Reagent (.RGT): K2CO3  
Catalyst (.CAT): <IrCl(cod)>2  
Solvent (.SOL): toluene  
Time (.TIM): 12 hour(s)  
Temperature (T): 20 Cel  
Reference(s):  
1. Kiyooka, Syun-ichi; Wada, Yosuke; Ueno, Mahuyu; Yokoyama, Takeshi; Yokoyama, Reiko, Tetrahedron, CODEN: TETRA, 63(51), <2007>, 12695 - 12701; BABS-6717870

**1 フィールドあたり 1 表示料金**  
1 つの物質レコードで、複数の反応情報を表示しても 880 円

**1 反応あたり 1 表示料金**  
反応情報を多数表示すると表示料金が高額になる場合がある

## B 反応検索

### ReaxysFile ファイルの検索

- 反応レコードでは、生成物と反応物の両方を指定した反応検索や試薬や溶媒などの反応条件を指定した反応検索ができる（物質レコードでは反応検索はできない）。
- 生成物、反応物を指定して検索する場合には、レコード番号（AN）で検索する。

=> S 反応物のレコード番号/RX.RAN AND 生成物のレコード番号/RX.PAN

- 主な反応検索フィールド \*1, \*2

種類	内容	入力例	演算子		
反応情報	反応物 (AN)	=> S 50000/RX.RAN	AND		
	反応物	=> S L-PROLINE/RX.RCT			
	生成物 (AN)	=> S 1915876/RX.PAN			
	生成物	=> S GLYCINE/RX.PRO			
反応の詳細	試薬 (名称, 分子式)	=> S ACETONE/RX.RGT	(P)	AND	
	触媒 (名称, 分子式)	=> S SNBR2/RX.CAT			
	溶媒 (名称, 分子式)	=> S CH2CL2/RX.SOL			
	収率	=> S 99.99/RX.YD			
	反応温度	=> S -100--10/RX.T			
	反応時間	=> S "2.0 HOUR(S)"/RX.TIM			
	pH 値	=> S RX.PH<1			
	圧力	=> S 1-25/RX.P			
	反応分類	=> S PREPARATION/RX.CL			
	出典情報	著者名	=> S COREY?/AU.RX		AND
		資料名	=> S SYNTHESIS/JT.RX		
		CODEN	=> S JACSAT/ISN.RX		
		特許出願人	=> S AJINOMOTO/PA.RX		
		特許番号	=> S US 2986578/PN.RX		

\*1 これらの検索フィールドを利用した検索を実行すると、自動的に反応レコードが得られる。また、これらの検索フィールドは物質レコードとの演算はできない。

\*2 反応条件の収録は不完全であるので、網羅的な検索をしたい場合には利用しない方がよい。

- ・ 同一反応に限定する場合は、(P) 演算子を利用する。

```

(P) Reaction Details:
    RX
    Reaction RID (.RID):      10398133.1
    Reaction Classification (.CL): Preparation
    Yield (.YDT):            65 percent (AN=878307)
    Reagent (.RGT):          12
    Solvent (.SOL):          triethylene glycol
    Time (.TIM):              2 hour(s)
  
```

## B 反応検索

### ReaxysFile ファイルの検索

#### ■ 検索例：3-クロロニトロベンゼン (121-73-3) から 3-クロロアニリン (108-42-9) を得る反応

=> FILE REAXYSFILE ← ReaxysFile ファイルに入る

=> S 108-42-9 ← 生成物を CAS 登録番号で検索する (無料)  
 L1 2 108-42-9  
 (108-42-9/RN, BPR)

=> SEL CN MF LSF ← SELECT コマンドで, 化学物質名 (CN),  
 E1 THROUGH E6 ASSIGNED 分子式 (MF), 示性式 (LSF) を抽出する  
 (無料)

=> D SEL E1-E6 ← 抽出したタームを表示する (無料)

E1	2	C6 H6 CL N /MF
E2	1	C6H6CLN(1+)/LSF
E3	1	3-CHLOR-ANILIN/CN
E4	1	3-CHLORO-ANILINE/CN
E5	1	3-CHLORO-BENZENAMINE/CN
E6	1	3-CHLORO-PHENYLAMINE/CN

=> S L1 NOT E2 ← L1 から不要な示性式を含むレコードを除く  
 L2 1 L1 NOT "C6H6CLN(1+)/LSF" (無料)

=> SEL AN ← 絞り込んだ 1 件のレコードからレコード番号  
 E7 THROUGH E7 ASSIGNED (AN) を抽出する (無料)

=> D SEL E7 ← 抽出した レコード番号 (AN) を表示する  
 E7 1 605969/AN (無料)

=> S 121-73-3 ← 反応物の CAS 登録番号で検索する (無料)  
 L3 4 121-73-3  
 (121-73-3/RN, BPR)

=> SEL CN MF LSF ← SELECT コマンドで, 化学物質名 (CN),  
 E8 THROUGH E15 ASSIGNED 分子式 (MF), 示性式 (LSF) を抽出する  
 (無料)

=> D SEL E8-E15

E8	4	C6 H4 CL N O2 /MF
E9	3	C6H4CLNO2(1-)/LSF
E10	3	1-CHLORO-3-NITRO-BE
E11	1	M-NITROCHLOROBENZOL
E12	1	1-CHLOR-3-NITRO-BE
E13	1	3-CHLORO-NITROBENZENE/CN
E14	1	3-CHLORONITROBENZENE ANION
E15	1	3-CHLORONITROBENZENE ANION/

ReaxysFile ファイルで, 化学物質名称検索や CAS 登録番号検索をした場合に, 目的の化学物質がひとつであっても複数の回答が得られる場合がある。ヒットした物質の確認や絞り込みには, SELECT コマンドを利用する (SELECT が有料のフィールドもあるので注意)。

=> S L3 NOT (E9, E11, E14-E15)

L4 1 L3 NOT ((("C6H4CLNO2(1-)/LSF OR M-NITROCHLOROBENZOL-ANION/CN OR "3-CHLORONITROBENZENE ANION RADICAL"/CN OR "3-CHLORONITROBENZENE ANION"/CN))

=> SEL AN ← 絞り込んだ 1 件のレコードからレコード番号  
 E16 THROUGH E16 ASSIGNED (AN) を抽出する (無料)

=> D SEL E16 ← 抽出したレコード番号 (AN) を表示する (無料)  
 E16 1 1907947/AN



## B 反応検索

### ReaxysFile ファイルの検索

=> S 1907947/RX.RAN AND 605969/RX.PAN ← 各物質のレコード番号で検索する  
L5 23 1907947/RX.RAN AND 605969/RX.PAN (無料)

=> D 1 22 23 RX ← 1 番目, 22 番目, 23 番目の反応を  
RX 表示形式で表示する (880×3 = 2,640円)  
L5 ANSWER 1 OF 23 REAXYSFILE COPYRIGHT 2010 Elsevier Properties SA. on STN

#### Reaction:

RX

Reaction ID: 9779233  
Reactant AN (.RAN): 1907947  
Reactant (.RCT): 1-chloro-3-nitro-benzene  
Product AN (.PAN): 605969, 605631, 507540  
Product (.PRO): 3-chloro-aniline, aniline, nitrobenzene  
No. of React. Details (.NVAR): 2

#### Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 9779233.1  
Reaction Classification (.CL): Chemical behaviour  
Yield (.YDT): 95.5 percent Chromat. (AN=605969), 0.3 percent Chromat. (AN=605631), 1.3 percent Chromat. (AN=507540)  
Reagent (.RGT): H2  
Catalyst (.CAT): PtMn/carbon nanotubes  
Solvent (.SOL): ethanol  
Temperature (.T): 29.85 Cel  
Other Conditions (.COND): normal pressure  
Subject Studied (.SUBJ): Kinetics, Product distribution  
Prototype Reaction (.PRT): Further Variations:, Catalysts, Temperatures

#### Reference(s):

1. Han, Xiaoxiang; Li, Jianrong, Indian J. Chem. Sect. A.: Inorg., Bio-inorg., Phys., Theor. Anal. Chem., CODEN: ICACEC, 46(11), <2007>, 1747 - 1752; BABS-6721206

RX

Reaction RID (.RID): 9779233.2  
Reaction Classification (.CL): Chemical behaviour  
Reagent (.RGT): H2  
Catalyst (.CAT): Pt/TiO2  
Solvent (.SOL): ethanol  
Time (.TIM): 75 min  
Temperature (.T): 29.85 Cel  
Pressure (.P): 750.06 Torr  
Subject Studied (.SUBJ): Product distribution  
Prototype Reaction (.PRT): Further Variations:, Catalysts

#### Reference(s):

1. Lai, G. H.; Han, X. X.; Zhou, R. X.; Zhang, J. X.; Zheng, X. M., Indian J. Chem. Sect. A.: Inorg., Bio-inorg., Phys., Theor. Anal. Chem., CODEN: ICACEC, 43(12), <2004>, 2545 - 2548; BABS-6485342

CASREACT ファイルでは  
ヒットしなかった文献

## B 反応検索

### ReaxysFile ファイルの検索

L5 ANSWER 22 OF 23 REAXYSFILE COPYRIGHT 2010 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

Reaction ID: 281332  
 Reactant AN (.RAN): 1907947  
 Reactant (.RCT): 1-chloro-3-nitro-benzene  
 Product AN (.PAN): 605969, 636837  
 Product (.PRO): 3-chloro-aniline, 3,4-dichloro-aniline  
 No. of React. Details (.NVAR): 1

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 281332.1  
 Reaction Classification (.CL): Nitration  
 Reagent (.RGT): HCl, hydrochloric acid  
 Note(s) (.COM): Handbook

Reference(s):

1. Beilstein; Kurbatow, Zh. Russ. Fiz.-Khim. O-va, CODEN: ZRKOAC, 11, <1879>, 328; Justus Liebigs Ann. Chem., CODEN: JLACBF, 196, <1879>, 218

L5 ANSWER 23 OF 23 REAXYSFILE COPYRIGHT 2010 Elsevier Properties SA. on STN

Reaction:

RX

Reaction ID: 281331  
 Reactant AN (.RAN): 1907947  
 Reactant (.RCT): 1-chloro-3-nitro-benzene  
 Product AN (.PAN): 605969  
 Product (.PRO): 3-chloro-aniline  
 No. of React. Details (.NVAR): 49

Reaction Details:

RX

Reaction RID (.RID): 281331.1  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 98 percent (AN=605969)  
 Reagent (.RGT): H2  
 Catalyst (.CAT): <Pd(acac)(Ph2P-2-C6H4COOH)2>BF4  
 Solvent (.SOL): dimethylformamide  
 Temperature (.T): 25 Cel  
 Pressure (.P): 1140 Torr

Reference(s):

1. Rani, P. Usha; Reddy, P. Muralidhar; Sarangapani, M.; Ravinder, V., J. Indian Chem. Soc., CODEN: JICSAH, 84(2), <2007>, 122 - 129; BABS-6722762

RX

Reaction RID (.RID): 281331.2  
 Reaction Classification (.CL): Preparation  
 Yield (.YDT): 73 percent (AN=605969)  
 Reagent (.RGT): H2  
 Catalyst (.CAT): polymer incarcerated platinum  
 Solvent (.SOL): tetrahydrofuran  
 Time (.TIM): 1 hour(s)  
 Temperature (.T): 20 Cel  
 Other Conditions (.COND): atmospheric pressure  
 :

## B 反応検索

### ReaxysFile ファイルの検索

RX

Reaction RID (.RID): 281331.9  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Yield (.YDT): 99 percent (AN=605969)  
Reagent (.RGT): H2, ethylenediaminetetraacetic acid  
disodium salt  
Catalyst (.CAT): FeSO4\*7H2O  
Solvent (.SOL): H2O  
Time (.TIM): 2.0 hour(s)  
Temperature (.T): 150 Cel  
Pressure (.P): 20685.9 Torr

Reference(s):

1. Deshpande, Raj. M.; Mahajan, Avinash. N.; Diwakar, Makarand. M.;  
Ozarde, Prakash. S.; Chaudhari, R. V., J. Org. Chem., CODEN: JOCEAH,  
69(14), <2004>, 4835 - 4838; BABS-6458477

RX

Reaction RID (.RID): 281331.44  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Reagent (.RGT): CuO/Cr2O3  
Temperature (.T): 150 Cel  
Pressure (.P): 88260.9 Torr  
Other Conditions (.COND): Hydrogenation  
Reference(s):

1. Patent: Columbia Southern Chem. Corp. US 2791613 1953

CASREACT ファイルでも  
ヒットしていた文献

RX

Reaction RID (.RID): 281331.45  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Reagent (.RGT): rhodium  
Temperature (.T): 120 Cel  
Pressure (.P): 5884.06 Torr  
Other Conditions (.COND): Hydrogenation  
Reference(s):

1. Patent: Columbia Southern Chem. Corp. US 2772313 1953

RX

Reaction RID (.RID): 281331.46  
Reaction Classification (.CL): Preparation  
Reagent (.RGT): platinum/charcoal  
Temperature (.T): 85 Cel  
Pressure (.P): 300 Torr  
Other Conditions (.COND): Hydrogenation  
Reference(s):

1. Patent: Du Pont de Nemours & Co. US 2765342 1952



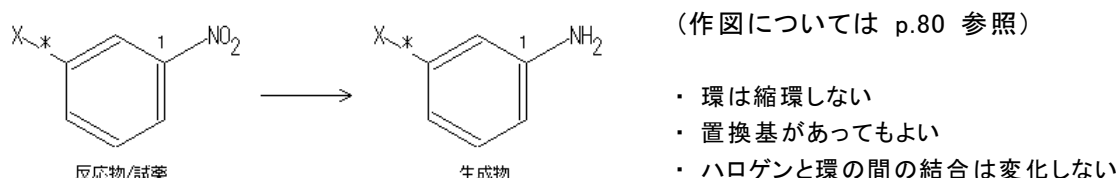
ReaxysFile ファイルの反応レコード中の文献 (Reference) 情報は、  
参考情報として収録されており、この中に含まれている情報を抽出し  
たり検索したりすることができない。  
したがって、他の反応情報収録ファイルとの重複除去はできない。

## B 反応検索

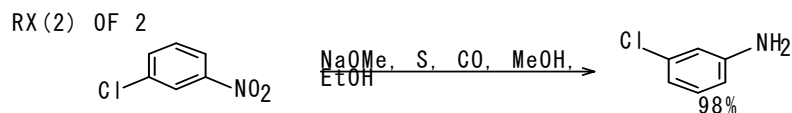
### 検索例

■ 置換基も含めた誘導体の反応検索には、反応質問式を用いた構造検索が有効である。

■ 検索例：次の反応を検索する（件数が多い場合は、収率 80%以上のものに限定）。



=> FILE CASREACT ← CASREACT ファイルに入る  
=> ← 反応質問式をアップロードする  
Uploading C:\Documents and Settings\user\My Documents\STN Express 8.3\Queries\rct1.str  
L1 STRUCTURE UPLOADED  
=> S L1 ← サンプル検索を実行する (無料)  
L2 50 SEA SSS SAM L1 ( 154 REACTIONS)  
=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)  
L2 50 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
T1 Method for carbonylative reduction of organic nitro compounds



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行する (15,300 円)  
FULL SEARCH INITIATED 16:04:04 FILE 'CASREACT'  
SCREENING COMPLETE - 101625 REACTIONS TO VERIFY FROM 9803 DOCUMENTS  
100.0% DONE 101625 VERIFIED 3986 HIT RXNS ( 23 INCOMP) 1138 DOCS  
SEARCH TIME: 00.00.17  
L3 1138 SEA SSS FUL L1 ( 3986 REACTIONS)  
=> S L3/COM ← イタレーション検索が完了した回答に  
限定する  
L4 1138 L3/COM  
=> S L4 (A) (80<=YD OR NONE/YDT) ← 収率情報を掛け合わせる (262×2 = 524 円)  
L5 922 L3 (A) (80<=YD OR NONE/YDT)  
=> S L5 (L) ANY/CAT ← さらに触媒を使った反応に限定する (262 円)  
L6 384 L5 (L) ANY/CAT

B 反応検索

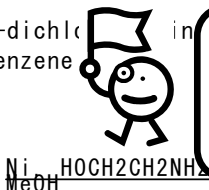
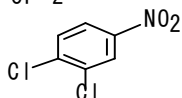
検索例

=> D SCAN

L6 384 ANSWERS CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN

TI Preparation of 3,4-dichloro-  
3,4-dichloronitrobenzene

RX(1) OF 2



生成物を作図した構造検索結果に収率の情報を  
掛け合わせる場合には, (A) 演算子を使用する.  
他の反応条件に収率を掛け合わせる場合には,  
(L) 演算子を使用する.

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D 4 384 BIB IT FHIT

← 4 番目と 384 番目の書誌情報と索引,  
ヒットした最初の反応を表示する  
(496×2 = 992 円)

L6 ANSWER 4 OF 384 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN

AN 148:331423 CASREACT Full-text

TI Preparation of phenyloxylaniline derivatives as diagnostic imaging agents  
of the central nervous system

IN Lehmann, Lutz; Rother, Axel

PA Bayer Schering Pharma Aktiengesellschaft, Germany

SO Eur. Pat. Appl., 43pp.

CODEN: EPXXDW

DT Patent

LA English

FAN. CNT 1

	PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
PI	EP 1894915	A1	20080305	EP 2006-18455	20060904

IT Central nervous system

Imaging

Imaging agents

Nervous system, disease

(preparation of phenyloxylaniline derivs. as diagnostic imaging agents of  
central nervous system)

IT Aromatic compounds

RL: DGN (Diagnostic use); IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant);

SPN (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation);

RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)

(preparation of phenyloxylaniline derivs. as diagnostic imaging agents of  
central nervous system)

IT 220553-37-7P, N-(5-Fluoro-2-phenoxyphenyl)-N-(2-hydroxy-5-  
methoxybenzyl)acetamide 1010391-60-2P, N-(5-Fluoro-2-phenoxyphenyl)-N-[5-  
methoxy-2-[2-[(methanesulfonyl)oxy]ethoxy]benzyl]acetamide 1010391-66-8P  
1010391-70-4P 1010391-76-0P

RL: DGN (Diagnostic use); IMF (Industrial manufacture); RCT (Reactant);

SPN (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation);

RACT (Reactant or reagent); USES (Uses)

(preparation of phenyloxylaniline derivs. as diagnostic imaging agents of  
central nervous system)

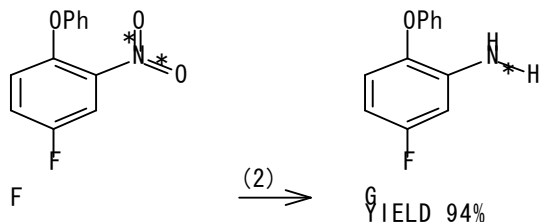
IT 505084-42-4P 686349-74-6P, N-(5-Fluoro-2-phenoxyphenyl)-N-[2-[2-[(4-  
methylphenylsulfonyl)oxy]ethoxy]-5-methoxybenzyl]acetamide  
1010391-63-5P, N-(5-Fluoro-2-phenoxyphenyl)-N-[2-(2-bromoethoxy)-5-  
methoxybenzyl]acetamide 1010391-68-0P 1010391-72-6P 1010391-74-8P  
1010391-78-2P 1010391-80-6P 1010391-82-8P 1010391-84-0P

B 反応検索

検索例

- 1010391-86-2P 1010391-88-4P  
 RL: DGN (Diagnostic use); IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation); BIOL (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)  
 (preparation of phenyloxylaniline derivs. as diagnostic imaging agents of central nervous system)
- IT 672-13-9, 2-Hydroxy-5-methoxybenzaldehyde 1462-37-9,  
 (2-Bromoethoxymethyl)benzene 4672-49-5, 1,2-Bismethanesulfonyloxyethane  
 6315-52-2 17739-45-6, 2-(2-Bromoethoxy)tetrahydropyran 41951-76-2,  
 2-Hydroxymethyl-4-methoxyphenol 613662-00-3, 4-Fluoro-2-nitro-1-  
 phenoxybenzene  
 RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)  
 (preparation of phenyloxylaniline derivs. as diagnostic imaging agents of central nervous system)
- IT 203803-86-5P, 2-(2-Benzyloxyethoxy)-5-methoxybenzaldehyde 613662-01-4P,  
 5-Fluoro-2-phenoxyphenylamine 911831-33-9P, 5-Methoxy-2-[2-[(4-  
 methylphenylsulfonyl)oxy]ethoxy]benzaldehyde 1010391-91-9P,  
 5-Methoxy-2-[2-((tetrahydropyran-2-yl)oxy)ethoxy]benzaldehyde  
 1010391-94-2P, N-(5-Fluoro-2-phenoxyphenyl)-N-[5-methoxy-2-[2-  
 ((tetrahydropyran-2-yl)oxy)ethoxy]benzyl]amine 1010391-98-6P,  
 [2-(2-Benzyloxyethoxy)-5-methoxybenzyl](5-fluoro-2-phenoxyphenyl)amine  
 1010392-01-4P, 5-Methoxy-2-[2-[(methanesulfonyl)oxy]ethoxy]benzaldehyde  
 1010392-03-6P, (5-Fluoro-2-phenoxyphenyl)[5-methoxy-2-[2-  
 [(methanesulfonyl)oxy]ethoxy]benzyl]amine 1010392-08-1P,  
 (5-Fluoro-2-phenoxyphenyl)[5-methoxy-2-[2-[(4-  
 methylphenylsulfonyl)oxy]ethoxy]benzyl]amine 1010392-10-5P,  
 2-(2-Hydroxymethyl-4-methoxyphenoxy)ethanol 1010392-12-7P,  
 Methanesulfonic acid 2-(2-((methanesulfonyl)oxy)ethoxy)-5-methoxybenzyl  
 ester  
 RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT  
 (Reactant or reagent)  
 (preparation of phenyloxylaniline derivs. as diagnostic imaging agents of central nervous system)
- IT 23978-09-8, Kryptofix 222  
 RL: RGT (Reagent); RACT (Reactant or reagent)  
 (preparation of phenyloxylaniline derivs. as diagnostic imaging agents of central nervous system)

RX(2) OF 109 F ==> G...



RX(2) RCT F 613662-00-3  
 RGT H 1333-74-0 H2  
 PRO G 613662-01-4  
 CAT 7440-05-3 Pd  
 SOL 67-63-0 Me2CHOH  
 CON SUBSTAGE(1) 20 deg C  
 SUBSTAGE(2) 8 hours, 25 deg C



反応情報には触媒が含まれているが、CA ファイルの索引フィールドには、触媒が索引されていない(主題に関連性の低い一般的な反応と考えられる)。したがって、REGISTRY ファイルで生成物と反応物を検索した結果をCAplus/CA ファイルにクロスオーバーし、触媒のCAS ロール(CAT/RL)で限定すると、このレコードはヒットしない。

RE. CNT 3 THERE ARE 3 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD  
 ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

## B 反応検索

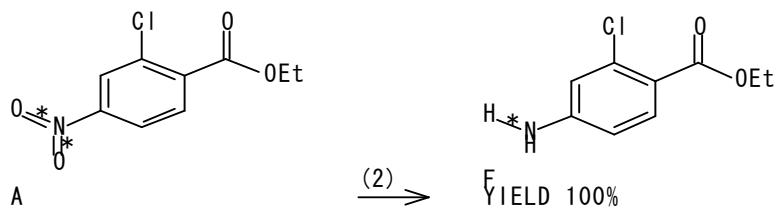
### 検索例

L6 ANSWER 384 OF 384 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
 AN 44:12533 CASREACT Full-text  
 TI Side reaction in the hydrogenation of 4-nitro-2-chlorobenzoic acid and its esters  
 AU Weizmann, Anna  
 CS Weizmann Inst. of Sci., Rehovot, Israel  
 SO Journal of the American Chemical Society (1949), 71, 4154-5  
 CODEN: JACSAT; ISSN: 0002-7863  
 DT Journal  
 LA Unavailable  
 IT Hydrogenation  
 (of 2-chloro-4-nitrobenzoic acid and its esters)  
 IT 100-37-8, Ethanol, 2-diethylamino-  
 (esters)  
 IT 99-60-5, Benzoic acid, 2-chloro-4-nitro-  
 (hydrogenation of, and its esters)  
 IT 119342-76-6P, Benzoic acid, 4,4'-azoxybis[2-chloro-, diethyl ester  
 855198-14-0P, Benzoic acid, 2-chloro-4-hydroxyamino-, 2-diethylaminoethyl  
 ester 855203-44-0P, Benzoic acid, 4,4'-azoxybis[2-chloro-  
 RL: PREP (Preparation)  
 (preparation of)  
 IT 109-99-9, Furan, tetrahydro-  
 (reaction with BzCl)  
 IT 98-88-4, Benzoyl chloride  
 (reaction with tetrahydrofuran)

PREP 以外の CAS ロールを用いた  
 検索では得られない 1966 年以前  
 の文献もヒットする

1966 年以前のレコードの場合、CAS ロール  
 は PREP のみ索引されている

RX(2) OF 2 A ==> F



RX(2) RCT A **73097-02-6**  
 RGT C 1333-74-0 H2  
 PRO F **16017-69-9**  
 CAT 7440-05-3 Pd  
 SOL 141-78-6 AcOEt  
 NTE Classification: Hydrogenation; N-Deoxygenation; # Conditions: H2  
 Pd-BaSO4; EtOAc; 3h 20 deg/1atm ; # Comments: other examples

## B 反応検索

### 検索例

#### ■ 酵素反応に限定する.

- CASREACT ファイルには, 生化学分野の反応情報も収録されている.  
(2008 年 8 月現在約 35,000 件 (レコード数))
- NTE フィールドには反応の説明 (非統制語) が入力されている. このため, 酵素触媒反応や酵素を表すキーワードに /NTE を付けて検索すると, これに関するレコードが得られる.
  - 反応検索した回答セットと酵素触媒反応や酵素を表すキーワードを (L) 演算子で組み合わせると, 酵素触媒反応に限定できる.

=> S L1 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE

- より多くの回答を得るためには, /NTE フィールドで酵素名も併用して検索する.

=> S L5 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE ← 収率で限定した結果を酵素反応に限定する  
L7 6 L5 (L) (ENZYM? OR BIOTRANSFORM?)/NTE (262×2 = 524 件)

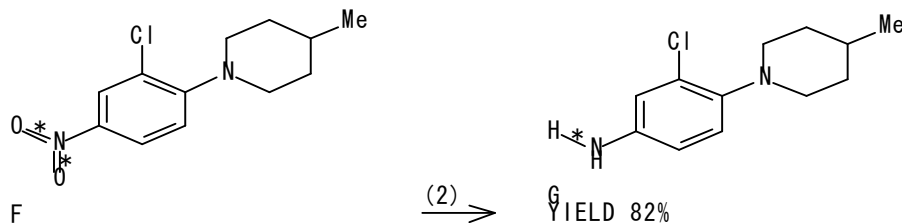
=> D 1 BIB FHIT ← 1 番目の書誌情報とヒットした最初の  
反応を表示する (450×2 = 900 件)

L7 ANSWER 1 OF 6 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN  
AN 145:375385 CASREACT Full-text  
TI Effect of the structure of nitro  
yeast (*Saccharomyces cerevisiae*)  
AU Begunov, R. S.; Kosarev, V. N.  
CS Yarosl. Gos. Universit.  
SO Izvestiya Vysshikh Uchebn. Zavedeni  
Tehnologiya (2005), 48(11), 56  
CODEN: IVUKAR; ISSN: 0579-2991  
PB Ivanovskii Gosudarstvennyi Khim  
DT Journal  
LA Russian

CASREACT ファイルでは, 反応に関与するすべての物質が索引されているので, 主たる生成物ではない物質 (副生成物など) も生成物として含まれることがある. 回答件数が多い場合には収率など他の条件で回答を絞り込むとよい.

- 生成物とリンクする場合 : (A) 演算子
- 生成物以外とリンクする場合 : (L) 演算子

RX (2) OF 22 F ==> G



RX (2) RCT F 927703-57-  
RGT C 1310-73-2  
PRO G 626208-15-  
SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH  
CON 12 hours, 40 deg C  
NTE biotransformation, green chemical, baker's yeast  
(*Saccharomyces cerevisiae*) as reducing agent used, described  
medium

酵素反応の文献  
がヒットする



## B 反応検索

### まとめ

#### ■ CASREACT ファイルでの検索

- ・ 反応物と生成物，触媒などを (L) 演算子でリンクし，同一反応内に限定する。
  - 反応物や生成物の指定には，CAS 登録番号のほか，REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号（辞書検索または構造検索）を利用することができる。
  - 官能基用語を用いた官能基反応検索ができる。
- ・ 生成物に収率情報を組み合わせるときは (A) 演算子を使用する。
  - 入力例 :=> S 106-47-8/RCT (L) 100-00-5/PRO (A) (90<=YD OR NONE/YDT)
  - NONE/YDT を OR 演算すると，収率情報のないレコードも含めることができる。
  - 生成物以外と収率情報を組み合わせるときは (L) 演算子を使用する。

#### ■ CAplus ファイルでの検索

- ・ 反応物と生成物，触媒などは AND 演算子で組み合わせる。  
(同一反応内には限定できない)。
  - 反応物や生成物の指定には，CAS 登録番号のほか，REGISTRY ファイルの回答セットの L 番号（辞書検索または構造検索）を利用することができる。

#### ■ ReaxysFile ファイルでの検索

- ・ 反応レコードでは，生成物と反応物の両方を指定した反応検索や，試薬や溶媒などの反応条件を指定した反応検索ができる。
  - 試薬や触媒，溶媒，収率などの反応条件を同一反応内に限定する場合には (P) 演算子を使用する。
- ・ 反応検索フィールドを利用した検索を実行すると，自動的に反応レコードが得られる。
- ・ 生成物と反応物を指定して検索する場合には，レコード番号で検索する。



## C その他の反応情報収録ファイル

これまでご紹介した以外に反応情報を検索できるファイルをご紹介します。



C その他の反応情報収録ファイル

ChemInformRX ファイルとDJSMONLINE/DJSMDS (会員用) ファイル

■ ChemInformRX ファイルと DJSMONLINE/DJSMDS (会員用) ファイル

2008 年 8 月現在

ファイル名	CHEMINFORMRX	DJSMONLINE/DJSMDS	
製作者	FIZ CHEMIE GmbH	Thomson Reuters	
収録期間	1991 年以降	1975-2007 年	
収録源	雑誌	雑誌: 1975-1999 年半ば 特許: 1975 年以降	
反応数	一段階反応: 949,600 件 多段階反応: 475,000 件	一段階反応: 76,100 件 多段階反応: 5,700 件	
更新頻度	年 4 回	不定期	
レコード単位	文献	反応	
検索機能	構造	○ (生成物, 反応物, 試薬)	○ (1980 年以降) (生成物, 反応物)
	CAS 登録番号	○ (生成物, 反応物, 試薬, 溶媒, 触媒)	×
	官能基名	×	△ (部分構造用語が利用できる)
	REGISTRY ファイルからのクロスオーバー	○ (生成物, 反応物, 試薬, 溶媒, 触媒)	×
	反応関与物質の相互リンク	○ (生成物, 反応物, 試薬, 溶媒, 触媒)	○ (生成物, 反応物, 溶媒, 触媒)
	その他	ルールや反応部位, マッピングを指定して構造検索できる	ルールや反応部位, マッピングを指定して構造検索できる
特徴	構造検索時の無料のサンプル検索が利用できる SCAN 表示形式 (無料) で反応図を確認することができる	新規合成法, および合成法として意義のある既知合成法の改良法を収録 関連のある以前の技術および類似の反応情報へのクロスリファレンスを収録 辞書検索の検索料は無料 構造検索時の無料のサンプル検索はない	

## C その他の反応情報収録ファイル

### ChemInformRX ファイルとDJSMONLINE/DJSMDS (会員用) ファイル

- ChemInformRX ファイルおよび DJSMONLINE/DJSMDS (会員用) ファイルでは, CASREACT ファイルと同様に, 反応関与物質に対してロールを指定して反応検索ができる。

#### ■ 反応関与物質のロール

ロール	内容	入力例	ChemInformRX	DJSMONLINE
/RCT	反応物	=> S 101/RCT	○ *1	○ *2
/RCT.RN	反応物 - CAS 登録番号	=> S 50-00-0/RCT.RN	○	—
/RCT.KW	反応物 - キーワード	=> S MERCAPTAN/RCT.KW	○	○
/RCT.ST	反応物 - 補遺語	=> S CHIRAL/RCT.ST	—	○
/RGT	試薬	=> S 216/RGT	○ *1	—
/RGT.RN	試薬 - CAS 登録番号	=> S 121-44-8/RGT.RN	○	—
/RGT.CN	試薬 - 化学物質名	=> S TRIETHYLAMINE/RGT.CN	○	—
/RGT.KW	試薬 - キーワード	=> S SILANE/RGT.KW	○	○
/PRO	生成物	=> S 40/PRO	○ *1	○ *2
/PRO.RN	生成物 - CAS 登録番号	=> S 18354-17-1/PRO.RN	○	—
/PRO.KW	生成物 - キーワード	=> S PURINE/PRO.KW	○	○
/PRO.ST	生成物 - 補遺語	=> S CHIRAL/PRO.ST	—	○
/SOL	溶媒	=> S 12/SOL	○ *1	○ *3
/SOL.RN	溶媒 - CAS 登録番号	=> S 60-29-7/SOL.RN	○	—
/SOL.CN	溶媒 - 化学物質名	=> S TOLUENE/SOL.CN	○	○
/SOL.KW	溶媒 - キーワード	=> S ETHER/SOL.KW	○	○
/SOL.KW	溶媒 - 補遺語	=> S GAS/SOL.ST	—	○
/CAT	触媒	=> S 498/CAT	○ *1	○ *3
/CAT.RN	触媒 - CAS 登録番号	=> S 123-91-1/CAT.RN	○	—
/CAT.CN	触媒 - 化学物質名	=> S TICL3/CAT.CN	○	○
/CAT.KW	触媒 - キーワード	=> S PALLADIUM/CAT.KW	○	—
/CAT.ST	触媒 - 補遺語	=> S HYDRATE/CAT.ST	—	○

\*1 CI 登録番号と CAS 登録番号, RCT.KW フィールドからの切り出し語を含む

\*2 DJSM 登録番号と補遺語フィールドを含む

\*3 DJSM 登録番号と化学物質名, 補遺語フィールドを含む

- 構造検索では, 部分構造を指定した検索, 反応部位, マッピングを指定した検索ができる。

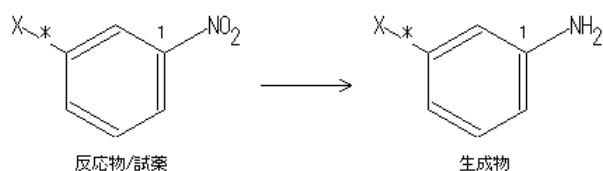
#### ■ 反応検索に用いる演算子

- ・ 反応関与物質を (L) 演算子でリンクさせることにより, 同一反応内に限定して検索 できる。
- ・ 生成物収率 (/YDP) と生成物をリンクする場合: (A) 演算子を利用する。
  - NONE/YDPT を OR 演算すると, 収率情報のないレコードも含めることができる。
  - 生成物以外と収率 (/YD) をリンクする場合は (L) 演算子を用いる。

C その他の反応情報収録ファイル

検索例 1

■ 検索例 1: 次の反応に関する検索



(作図については p.80 参照)

- ・ 環は縮環しない
- ・ 置換基があってもよい
- ・ ハロゲンと環の間の結合は変化しない

=> FILE CHEMINFORMRX

← CHEMINFORMRX ファイルに入る

=>

← 反応質問式をアップロードする

Uploading C:\Documents and Settings\user\My Documents\STN Express 8.3\Queries\rct1.str  
L1 STRUCTURE UPLOADED

=> S L1

← サンプル検索を実行する (無料)

SAMPLE SEARCH INITIATED 13:07:21 FILE 'CHEMINFORMRX'  
SCREENING COMPLETE - 275 REACTIONS TO VERIFY FROM 80 DOCUMENTS

100.0% DONE 275 VERIFIED 7 HIT RXNS 4 DOCS  
SEARCH TIME: 00.00.02

FULL FILE PROJECTIONS: ONLINE \*\*COMPLETE\*\*  
BATCH \*\*COMPLETE\*\*

PROJECTED VERIFICATIONS: 4507 TO 6493  
PROJECTED ANSWERS: 4 TO 199

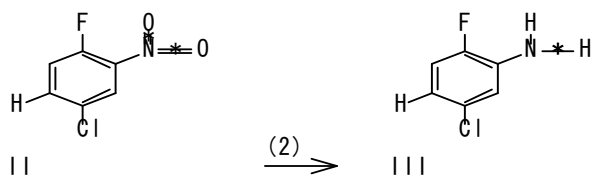
L2 4 SEA SSS SAM L1 ( 7 REACTIONS)

=> D SCAN

← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L2 4 ANSWERS CHEMINFORMRX COPYRIGHT 2008 FIZ CHEMIE on STN  
T1 Synthesis of 2-Halo-4,5-difluorobenzoic Acids.

RX(2) OF 21 ...B ==> F...



RX(2) RCT 11, 20749 (345-18-6)  
RGT 107 (1333-74-0), H2  
SOL 1 (110-71-4), DME  
CAT 1241 (7440-06-4), Pt-C  
PRO 111, 20750 (2106-05-0)  
P 3.5 atm  
TIM 24 hr  
NTE reaction:11 -> 111  
CMT Ratio = 2:8 for products 1,2

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

C その他の反応情報収録ファイル

検索例 1

=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行する (11,925 円)  
 FULL SEARCH INITIATED 13:07:45 FILE 'CHEMINFORMRX'  
 SCREENING COMPLETE - 5244 REACTIONS TO VERIFY FROM 1518 DOCUMENTS

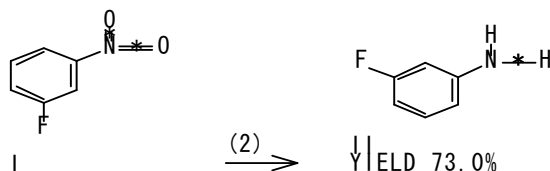
100.0% DONE 5244 VERIFIED 229 HIT RXNS 98 DOCS  
 SEARCH TIME: 00.00.12

L3 98 SEA SSS FUL L1 ( 229 REACTIONS)

=> D SCAN ← SCAN 表示形式で確認する (無料)

L3 98 ANSWERS CHEMINFORMRX COPYRIGHT 2008 FIZ CHEMIE on STN  
 T1 Efficient Reduction of Nitroarenes to Amines by Sodium Borohydride and  
 Cuprous Bromide-Dimethyl Sulfide.

RX(2) OF 5 G ==> H



RX(2) RCT I, 118392 (402-67-5)  
 STAGE(1)  
 RGT 339 (115827-49-1;54678-23-8), CuBr.Me2S  
 1156 (16940-66-2), NaBH4  
 SOL 206 (109-99-9), THF  
 T 10.0 Cel  
 STAGE(2)  
 SOL 123 (67-56-1), MeOH  
 T 5.0 - 10.0 Cel  
 PRO II, 137401 (372-19-0)  
 YDS 73.0 % ← 段階収率  
 NTE reaction:I -> II, example: 2

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D 1 3 BIB FHIT ← 1 番目と 3 番目の回答の書誌情報とヒットした  
 最初の反応を表示する (809×2 = 1,618 円)

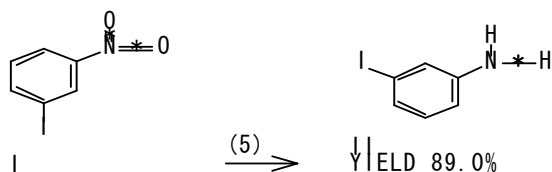
L3 ANSWER 1 OF 98 CHEMINFORMRX COPYRIGHT 2008 FIZ CHEMIE on STN  
 AN 200809080 CHEMINFORMRX Full-text  
 T1 Molybdenum Hexacarbonyl and DBU Reduction of Nitro Compounds under  
 Microwave Irradiation.  
 AU SPENCER, J.; ANJUM, N.; PATEL, H.; RATHNAM, R. P.; VERMA, J.  
 CS Sch. Sci., University Greenwich, Kent ME4 4TB, UK  
 SO Synlett(16), 2557-2558 (2007)  
 CODEN: SYNLES ISSN: 0936-5214  
 LA English



C その他の反応情報収録ファイル

検索例 1

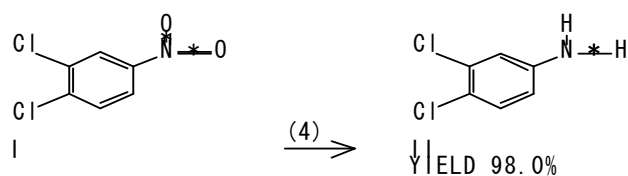
RX(5) OF 7 L ==> M



RX(5) RCT 1, 76168 (645-00-1)  
 RGT 1047 (13939-06-5), Mo(CO)<sub>6</sub>  
 1131 (6674-22-2), DBU  
 SOL 81 (64-17-5), EtOH  
 PRO 11, 190704 (626-01-7)  
 YDS 89.0 %  
 T 150.0 Cel  
 TIM 0.2 hr  
 NTE reaction: I -> II, example: 5

L3 ANSWER 3 OF 98 CHEMINFORMRX COPYRIGHT 2008 FIZ CHEMIE on STN  
 AN 200752072 CHEMINFORMRX Full-text  
 TI Efficient Reduction of Nitroarenes over Nickel-Iron Mixed Oxide Catalyst  
 Prepared from a Nickel-Iron Hydrotalcite Precursor.  
 AU SHI, Q.; LU, R.; LU, L.; FU, X.; ZHAO, D.  
 CS State Key Laboratory Fine Chemical, Dalian University Technol., Dalian 116012,  
 Peop. Rep. China  
 SO Adv. Synth. Catal., 349(11), 1877-1881 (2007)  
 CODEN: ASCAF7 ISSN: 1615-4150  
 LA English

RX(4) OF 12 J ==> K



RX(4) RCT 1, 79329 (99-54-7)  
 RGT 582 (302-01-2), H<sub>2</sub>N-NH<sub>2</sub>  
 SOL 115 (67-63-0), iPrOH  
 CAT 1249411, Ni-Fe mixed oxide  
 PRO 11, 33194 (95-76-1)  
 YDS 98.0 %  
 T. KW REFLUX  
 NTE reaction: I -> II, example: 4

C その他の反応情報収録ファイル

検索例 1

=> FILE DJSMONLINE ← *DJSMONLINE* ファイルに入る

=> S L1 FUL ← フルファイル検索を実行する (6,804 円)  
 FULL SEARCH INITIATED 11:13:10 FILE 'DJSMONLINE'  
 SCREENING COMPLETE - 203 REACTIONS TO VERIFY FROM 190 DOCUMENTS

100.0% DONE 203 VERIFIED 12 HIT RXNS 12 DOCS  
 SEARCH TIME: 00.00.06

L4 12 SEA SSS FUL L1 ( 12 REACTIONS)

=> D SCAN ← *SCAN* 表示形式 (レコード番号と標題) で確認する (無料)

L4 12 ANSWERS DJSMONLINE COPYRIGHT 2008 THE THOMSON CORP on STN  
 AN 1989:77757E DJSMONLINE  
 TI AR . AMINES FROM NITRO COMPDS . SELECTIVE REDUCTION

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L4 12 ANSWERS DJSMONLINE COPYRIGHT 2008 THE THOMSON CORP on STN  
 AN 1992:77029H DJSMONLINE  
 TI P-AMINOPHENOLS FROM AR . NITRO COMPDS

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END

=> D 1 8 BIB FHIT ← 1 件目と 8 件目の回答の書誌情報とヒットした最初の反応を表示する (903×2 = 1,806 円)

L4 ANSWER 1 OF 12 DJSMONLINE COPYRIGHT 2008 THOMSON REUTERS on STN  
 AN 2007:2101 DJSMONLINE  
 TI AR . AMINES FROM AR . NITRO COMPDS . PALLADIUM-CATALYZED HYDROGENATION UNDER MILD CONDITIONS  
 AU Rani, P. U.; Reddy, P. M.; Sarangapani, M.; Ravinder, V.  
 SO J Indian Chem Soc, 84(2), p.122-9 (2007)  
 CODEN: JICSAH ISSN: 0019-4522  
 DT Journal  
 VI 33-8

RX(1) OF 1 A ==> B



A

(1) →



B  
YIELD 98.0%

RX(1) RCT A, 5996  
 SOL 23, DMF  
 CAT 146210, [Pd(acac)(Ph2P-2-C6H4COOH)2]BF4; Catalytic amount  
 PRO B, 6001  
 T 25.0 Cel  
 P 1.5 atm  
 ATM H2  
 CMT Path A

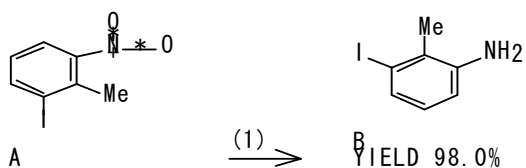
C その他の反応情報収録ファイル

検索例 1

L4 ANSWER 8 OF 12 DJSMONLINE COPYRIGHT 2008 THOMSON REUTERS on STN  
 AN 1996:0511 DJSMONLINE  
 TI AR . AMINES FROM AR . NITRO COMPDS . SELECTIVE REDUCTION  
 PA Nissan Chem Ind Ltd  
 PI JP 07233126  
 DT Patent  
 VI 22-3  
 OS WPI 1995-340230

WPI ファイルのレコード番号

RX(1) OF 1 A ==> B



RX(1) RCT A, 86943  
 SOL 31, EtOAc; 1 Part  
 CAT 93, Fe(m); Powder  
 1, AcOH; 1 Part  
 3854, Tf2NF; 2.4 Eq.  
 PRO B, 86944  
 T 70.0 Cel  
 TIM 1.0 hr  
 CMT Reflux  
 CMT Path A



参考: 化学反応 (REACTION) クラスターの利用 (次ページ以降参照)

化学反応 (REACTION) クラスターを利用すると, CASREACT, ChemInformRX, DJSMONLINE, PS ファイルで一度に同じ質問式を検索できる



## C その他の反応情報収録ファイル

参考: 化学反応 (REACTION) クラスターの利用

```
=> FILE REACTION          ← REACTION ファイルクラスターに入る
=> SET MSTEPS ON          ← ファイルごとに回答セットの L 番号を作成する設定
SET COMMAND COMPLETED

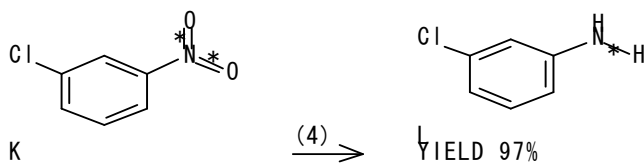
=> S L1 FUL                ← フルファイル検索を実行する
FILE 'CASREACT'
:
L3      1143 SEA SSS FUL L2 ( 4026 REACTIONS)
FILE 'CHEMINFORMRX'
:
L4      98 SEA SSS FUL L2 ( 229 REACTIONS)
FILE 'DJSMONLINE'
:
L5      12 SEA SSS FUL L2 ( 12 REACTIONS)
FILE 'PS'
:
L6      1 SEA SSS FUL L2 ( 1 REACTIONS)

TOTAL FOR ALL FILES
L7      1254 L2
```

```
=> D 1 CBIB FHIT          ← CASREACT ファイルの 1 番目の簡易型書誌情報と
                           ヒットした最初の反応を表示する (450 円)
```

```
L7 ANSWER 1 OF 1254 CASREACT COPYRIGHT 2008 ACS on STN
149:104482 Method for synthesis of chloroaniline by selective hydrogenation of
chloronitrobenzene in alcohol-water. Xu, Jie; Ning, Jianbo (Dalian
Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Peop. Rep.
China). Faming Zhuanli Shenqing Gongkai Shuomingshu CN 101195579 A
20080611, 10pp. (Chinese). CODEN: CNXXEV. APPLICATION: CN 2010-144344
20061204.
```

```
RX(4) OF 13      K ==> L
```



```
RX(4)  RCT K 121-73-3
        RGT C 1333-74-0 H2
        PRO L 108-42-9
        CAT 7440-18-8 Ru, 7631-86-9 SiO2
        SOL 7732-18-5 Water, 64-17-5 EtOH
        CON 25 minutes, 100 deg C
        NTE chemoselective
```

C その他の反応情報収録ファイル

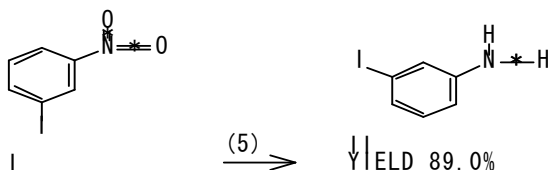
参考: 化学反応 (REACTION) クラスターの利用

=> D 1144 CBIB FHIT

← CHEMINFORMRX ファイルの 1 番目の簡易型書誌情報  
とヒットした最初の反応を表示する (809 円)

L7 ANSWER 1144 OF 1254 CHEMINFORMRX COPYRIGHT 2008 FIZ CHEMIE on STN  
200809080 Molybdenum Hexacarbonyl and DBU Reduction of Nitro Compounds  
under Microwave Irradiation. SPENCER, J.; ANJUM, N.; PATEL, H.;  
RATHNAM, R. P.; VERMA, J. Sch. Sci., University Greenwich, Kent ME4 4TB,  
UK Synlett(16), 2557-2558, (2007)  
CODEN: SYNLES ISSN: 0936-5214 English

RX(5) OF 7 L ==> M



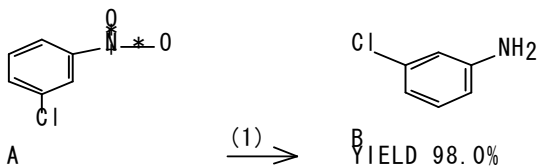
RX(5) RCT I, **76168** (645-00-1)  
RGT 1047 (13939-06-5), Mo(CO)<sub>6</sub>  
1131 (6674-22-2), DBU  
SOL 81 (64-17-5), EtOH  
PRO II, **190704** (626-01-7)  
YDS 89.0 %  
T 150.0 Cel  
TIM 0.2 hr  
NTE reaction: I -> II, example: 5

=> D 1242 CBIB FHIT

← DJSMONLINE ファイルの 1 番目の簡易型書誌情報と  
ヒットした最初の反応を表示する (903 円)

L7 ANSWER 1242 OF 1254 DJSMONLINE COPYRIGHT 2008 THOMSON REUTERS on STN  
2007:2101 AR . AMINES FROM AR . NITRO COMPDS . PALLADIUM-CATALYZED  
HYDROGENATION UNDER MILD CONDITIONS Rani, P. U.; Reddy, P. M.;  
Sarangapani, M.; Ravinder, V. J Indian Chem Soc, 84(2), p.122-9,  
(2007)  
CODEN: JICSAH ISSN: 0019-4522 Journal VI: 33-8

RX(1) OF 1 A ==> B



RX(1) RCT A, **5996**  
SOL 23, DMF  
CAT 146210, [Pd(acac)(Ph<sub>2</sub>P-2-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>COOH)<sub>2</sub>]BF<sub>4</sub>; Catalytic amount  
PRO B, **6001**  
T 25.0 Cel  
P 1.5 atm  
ATM H<sub>2</sub>  
CMT Path A

C その他の反応情報収録ファイル

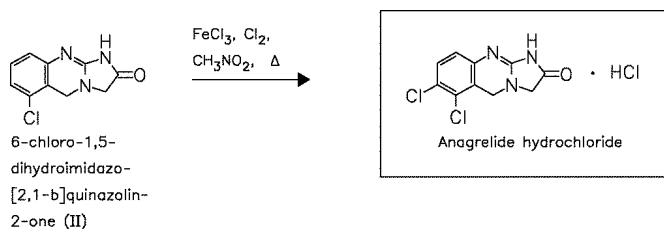
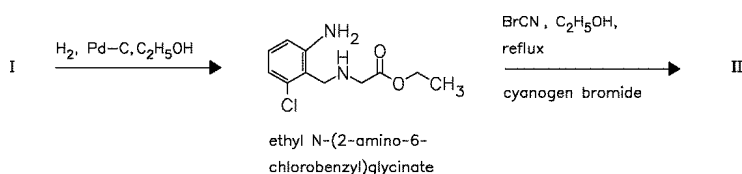
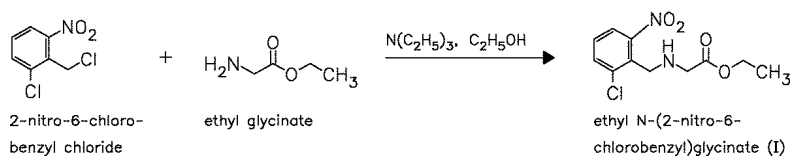
参考: 化学反応 (REACTION) クラスターの利用

=> D 1254 GI

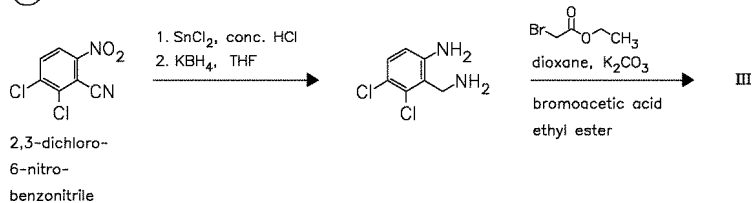
← PS ファイルの 1 番目の物質基本情報と  
反応イメージ図を表示する (1, 204 円)

L7 ANSWER 1254 OF 1254 PS COPYRIGHT 2008 THIEME on STN  
 AN 267183  
 DED 20030618  
 CN GENERIC: Anagrelide hydrochloride  
 CN SYNONYM: BL-4162A; BMY-26538-01  
 CN SYSTEMATIC: 6, 7-Dichloro-1, 5-dihydroimidazo[2, 1-b]quinazolin-2(3H)-  
 one hydrochloride  
 TN Agrylin  
 CC B01AC14  
 THER antithrombotic, phosphodiesterase III-inhibitor that reduces platelet  
 counts  
 RN 58579-51-4  
 MF C10H7Cl2N3O. HCl  
 MW 292.55  
 DEF Chlorine compounds, other  
 DEF Imidazo[2, 1-b]quinazolines  
 DEF Oxo compounds  
 DEF Prednisolones  
 DEF Steroids, disteroid hydrogen phosphates

(a)

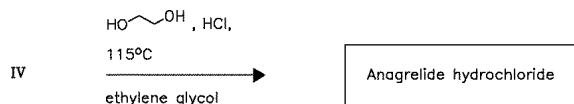
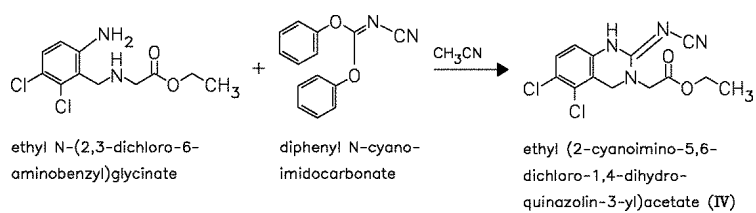


(b)

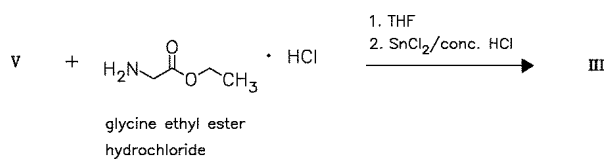
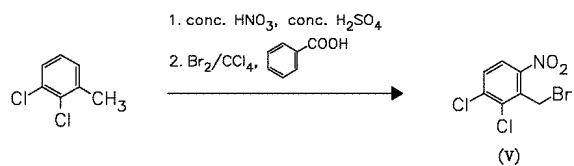


## C その他の反応情報収録ファイル

参考: 化学反応 (REACTION) クラスターの利用



alternative synthesis of anagrelide precursor III



START LOCAL KERMIT RECEIVE PROCESS

BINARY DATA HAS BEEN DOWNLOADED TO MULTIPLE FILES 'IMAGE<sub>nnn</sub>.TIF'



C その他の反応情報収録ファイル

医薬品合成データベース (PS ファイル)

■ 医薬品合成データベース一覧

ファイル名	PS ファイル
概要	世界中の上市された重要な医薬品のデータベース FDA が承認した Active pharmaceutical ingredients (APIs) を収録
収録源	冊子体「Pharmaceutical Substances - Synthesis, Patents, Applications」
収録年	1957 年以降
収録件数	2,410 件 (物質数), 8,200 件 (反応数)
更新頻度	年 2 回
レコード単位	医薬品単位
収録している内容	<p><b>化学物質同定情報</b> CAS 登録番号 化学物質名 (医薬品名, 国際一般名, 商品名) 分子式, 分子量</p> <p><b>医薬品関連情報</b> ATC (WHO) コード 薬効/適応症, LD50 化合物クラス, 誘導体 上市情報および製剤情報 (上市年, 上市国, 商品名, 会社名) 製剤情報</p> <p><b>反応情報</b> 合成法 (反応図) 反応関与物質 (原料・中間体) - CAS 登録番号 - 分子式 - 化学物質名称</p> <p><b>出典情報</b> 雑誌: 第一著者名, 原資料 特許: 特許番号, 出願人名, 特許発行日, 特許出願日, 優先権主張日</p>
ポイント	<p>構造検索・反応検索が可能 サンプル検索がない 反応検索は, ロールの指定のみ有効 - 反応部位, マッピングは指定しても無視される 医薬品の CAS 登録番号付与率 100% REGISTRY ファイルからのクロス オーバー検索で簡単に検索できる</p>



合成法のスキーム全体を簡単に表示できるのが特長

\* CASREACT ファイルは, FPATH で表示した後, RX(n) 表示形式で表示  
CAplus ファイル, ReaxysFile ファイルは文献中のスキーム全体を表示することはできない

C その他の反応情報収録ファイル

検索例 2

=> FILE PS

← PS ファイルに入る

=> E PROPECIA/CN 5

← 化学物質名称で EXPAND する

E1 1 PROPATYL NITRATE/CN  
 E2 1 PROPAXOLINE/CN  
 E3 1 --> PROPECIA/CN  
 E4 1 PROPENTOFYLLINE/CN  
 E5 1 PROPERICIAZINE/CN



直接名称でヒットしない場合は、REGISTRY  
 ファイルからのクロスオーバー検索も検討する

=> S E3

← E 番号で検索する (無料)

L1 1 PROPECIA/CN

=> D ALL

← ALL 表示形式で表示する (2,754 円)

L1 ANSWER 1 OF 1 PS COPYRIGHT 2008 THIEME on STN  
 AN 265465  
 DED 20030618  
 CN GENERIC: Finasteride  
 CN SYSTEMATIC: (5 $\alpha$ , 17 $\beta$ )-N-(1,1-dimethylethyl)-3-oxo-4-  
 azaandrost-1-ene-17-carboxamide  
 TN **Propecia**; Proscar; Chibro-Proscar; Propecia; Propecia; Proscar;  
 Finastid; Genaprost; Propecia; Proscar; Proscar  
 CC G04CA01  
 THER 5 $\alpha$ -reductase inhibitor, treatment of benign prostatic  
 hypertrophy (BPH)  
 RN 98319-26-7  
 MF C23H36N2O2  
 MW 372.55  
 LD50 486 mg/kg (M, p.o.);418 mg/kg (R, p.o.);>1 g/kg (dog, p.o.)  
 DEF Azasteroids  
 DEF Steroid carboxylic acids, amides and esters

TRD

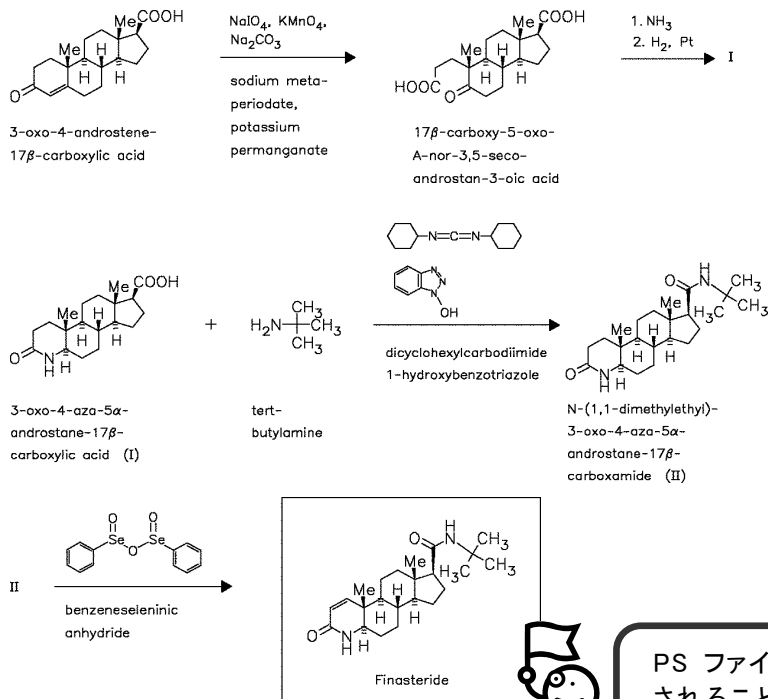
LN	LC	TN	CO	STA	COM
	DE	Propecia	Merck Sharp & Dohme		<--
	DE	Proscar	MSD Chibropharm		
	FR	Chibro-Proscar	Merck Sharp & Dohme-Chibret		
	FR	Propecia	Merck Sharp & Dohme-Chibret		<--
	GB	Propecia	Merck Sharp & Dohme		<--
	GB	Proscar	Merck Sharp & Dohme		
	IT	Finastid	Neopharmed		
	IT	Genaprost	Gentili		
	IT	Propecia	Merck Sharp & Dohme		<--
1991	IT	Proscar	Merck & Co.		
	US	Proscar	Merck		

FRM f. c. tabl. 5 mg

C その他の反応情報収録ファイル

検索例 2

PRE



PS ファイルでも、複数の合成スキームが表示されることがある（さらに、出典のところに改良合成法などがある場合もある）

INT

RN. INT	MF. INT	CN. INT
75-64-9 98319-24-5	C4H11N  C23H38N2O2	tert-butylamine; 2-Propanamine, 2-methyl-  N-(1,1-dimethylethyl)-3-oxo-4-aza-  5α-androstane-17β-carboxamide;  1H-Indeno[5,4-f]quinoline-7-carboxamide,  N-(1,1-dimethylethyl)hexadecahydro-4a,6a-  dimethyl-2-oxo-, [4aR-(4α,  4bβ,6αα,7α,9aβ,  9bα,11aβ)]-
302-97-6	C20H28O3	3-oxo-4-aza-5α-androstane-17β-carboxylic  acid; Androst-4-ene-17-carboxylic acid.  3-oxo-, (

中間体の情報（CAS 登録番号、名称など）も収録されている

RE

(1) US 4 760 071 (Merck & Co.; 26.7.1988; appl. 21.11.1985; USA-prior. 27.2.1984).

medical use for treatment of androgenic alopecia:

(2) Rasmusson, G.H. et al.: J. Med. Chemical (JMCMAR) 29, 2298 (1986).

(3) EP 285 382 (Merck & Co.; appl. 30.3.1988; USA-prior. 3.4.1987).

medical use for treatment of prostate carcinoma:

(4) US 5 571 817 (Merck & Co.; 5.11.1996; appl. 20.7.1993; USA-prior. 27.2.1984, 21.11.1985, 3.4.1987, 9.5.1988, 21.6.1989, 28.6.1990, 5.5.1991, 7.8.1992, 10.2.1993).

(5) EP 285 383 (Merck & Co.; appl. 30.3.1988; USA-prior. 3.4.1987).

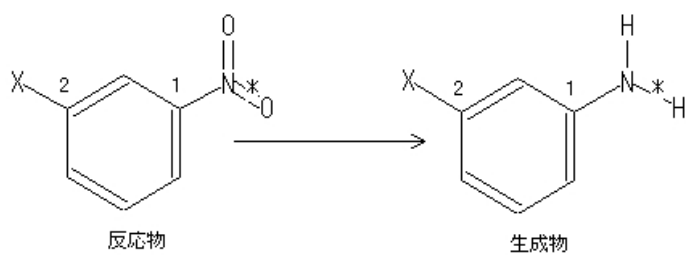
合成出典のほかに、関連する文献情報が収録されていることもある

START LOCAL KERMIT RECEIVE PROCESS

BINARY DATA HAS BEEN DOWNLOADED TO MULTIPLE FILES 'IMAGEenn.TIF'

## 参考

### ■ p.54, p.63 の作図例 (参考)



- ・ 環は縮環しない
- ・ 置換基があってもよい

- ・ 反応サイト (\*) の指定は, 上記のように反応する結合に対して, 最低限指定したほうがよい.